

CONTENTS

E. Khobotova, M. Ukhanyova, I. Grayvoronskaya, Ju. Kalmykova, Kharkiv National Automobile and Highway University, Ukraine RECYCLING OF METALLURGICAL SLAGS.....	3
E. Khobotova, Ju. Kalmykova, M. Ignatenko, Kharkiv National Automobile and Highway University, Ukraine CHEMICAL AND ECOLOGICAL JUSTIFICATION OF UTILIZATION OF BLAST FURNACE SLAGS IN PRODUCTION OF THE BINDERS.....	6
G. Simonian, Yerevan State University, Armenia CHEMICAL PROCESSES OF ABIOTIC OIL FORMATION.....	10
G. Simonian, Yerevan State University, Armenia AMINES REACTIVITY CRITERIA	14
M. Gorbichuk, T. Gumenyuk, D. Povarchuk, Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, Ukraine MODELING OF TECHNOLOGICAL OBJECTS ON THE BASIS OF EXPERIMENTAL DATA IN CONDITIONS OF UNCERTAINTY.....	18
B.O. Korobko, Poltava National Technical Yuri Kondratyuk University, Ukraine ANALYTICAL CALCULATIONS OF ENERGY CONSUMPTION WHEN MIXING SOLUTION WITH THE HELP OF FUNCTIONAL CHARACTERISTICS.....	22
H. Tagaev¹, N. Gapporov², B. Gapporov³, Jizzakh State Pedagogical Institute, Uzbekistan^{1,2}, Jizzakh Polytechnical Institute, Uzbekistan³ TAKING THE RESONANCE INTO ACCOUNT WHEN DESIGNING BRIDGE CROSSINGS.....	25
H. Tagaev, Jizzakh State Pedagogical Institute, Uzbekistan TAGAYEV'S THEORY OF THE SPECIFIED CALCULATION OF THE COMPOUND PENDULUM ARM.....	28

CONTENTS

Хоботова Э.Б., Уханёва М.И., Грайворонская И.В., Калмыкова Ю.С., <i>Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина</i> ВТОРИЧНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ.....	3
Хоботова Э.Б., Калмыкова Ю.С., Игнатенко М.И., <i>Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина</i> ХИМИКО-ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ УТИЛИЗАЦИИ ДОМЕННЫХ ШЛАКОВ В ПРОИЗВОДСТВЕ ВЯЖУЩИХ МАТЕРИАЛОВ.....	6
Симонян Г.С., <i>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения</i> ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ АБИОГЕННОЙ НЕФТИ.....	10
Симонян Г.С., <i>Ереванский государственный университет, Армения</i> КРИТЕРИИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АМИНОВ.....	14
Горбийчук М.И., Гуменюк Т.В., Поварчук Д.Д., <i>Ивано-Франковский национальный технический университет нефти и газа, Украина</i> МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМИ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ.....	18
В.О. Korobko, <i>Poltava National Technical Yuri Kondratyuk University, Ukraine</i> ANALYTICAL CALCULATIONS OF ENERGY CONSUMPTION WHEN MIXING SOLUTION WITH THE HELP OF FUNCTIONAL CHARACTERISTICS.....	22
Тагаев Х.¹, Гаппоров Н.Г.², Гаппоров Б.Н.³, <i>Джизакский государственный педагогический институт, Узбекистан^{1,2}, Джизакский Политехнический институт, Узбекистан³</i> УЧЕТ РЕЗОНАНСА ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ МОСТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ.....	25
Тагаев Х., <i>Джизакский государственный педагогический институт, Узбекистан</i> ТЕОРИЯ ТАГАЕВА ПО УТОЧНЕННОМУ РАСЧЕТУ ПЛЕЧО ФИЗИЧЕСКОГО МАЯТНИКА.....	28

RECYCLING OF METALLURGICAL SLAGS

E. Khobotova, Doctor of Chemistry, Full Professor
M. Ukhanyova, Postgraduate Student
I. Grayvoronskaya, Postgraduate Student
Ju. Kalmykova, Applicant
Kharkiv National Automobile and Highway University,
Ukraine

Authors have determined the useful properties of metallurgical slags for their utilization as technical materials - components of binders and sorbents used for the purification of industrial sewage. The quantitative indicators of determination of sorption activity and hydraulicity of wastes were substantiated.

Keywords: metallurgical slags, utilization, technical materials, binders, sorbents.

Conference participants


ВТОРИЧНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ

Хоботова Э.Б., д-р хим. наук, проф.
Уханёва М.И., аспирант
Грайворонская И.В., аспирант
Калмыкова Ю.С., соискатель
Харьковский национальный автомобильно-дорожный
университет, Украина

Выявлены полезные свойства металлургических шлаков для их утилизации в качестве технических материалов: компонентов вяжущих веществ и сорбентов для очистки промышленных сточных вод. Обоснованы количественные показатели определения сорбционной и гидравлической активности отходов.

Ключевые слова: металлургические шлаки, утилизация, технические материалы, вяжущие вещества, сорбенты.

Участники конференции

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1180>

Общая масса накопленных промышленных отходов составляет около 30 млрд. т. Низкий объём переработки отходов в Украине (10-15 %) обуславливает рост техногенного загрязнения всех компонентов окружающей природной среды (ОПС). Проблема отходов имеет ряд серьезных экологических и экономических аспектов и требует принятия неотложных мер по её решению. Решению проблемы промышленных отходов способствует оптимизация их использования, стимулирование и развитие безотходных технологий. Хорошо разработаны технологии утилизации отдельных видов промышленных отходов в строительные материалы [1, 2].

Целью работы являлось снижение техногенной нагрузки на ОПС в регионах с высоким уровнем накопления твердых промышленных отходов за счет выявления их полезных свойств и дальнейшей утилизации в качестве технических материалов.

Объекты исследования – отвалы доменные шлаки ОАО «Запорожсталь», ПАО «Мариупольский металлургический комбинат имени Ильича», ОАО Днепровский металлургический комбинат им. Ф.Э. Дзержинского (ОАО ДМК); отвалы и гранулированный доменный шлак ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог»; отвалы металлургические шлаки Побужского ферроникелевого комбината (ПФНК) производства сплава FeNi и Никопольского завода ферро-

сплавов (НЗФ) производства сплава FeSi. В работе обоснована эффективность практического использования доменных шлаков (отвалы и гранулированные) в производстве вяжущих материалов, что является актуальным в условиях нехватки кондиционного сырья в Украине. Направление утилизации определяется химическим элементом и минералогическим составом шлаков. Для отвалы шлаков производства ферросплавов и гранулированного доменного шлака ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог» (фракция >10 мм белого цвета) обоснована целесообразность вторичного использования в качестве сорбентов органических веществ при очистке промышленных сточных вод.

Экспериментальные методы исследования химического состава и технически полезных свойств шлаков. Использованы физико-химические методы исследования: рентгенофазовый, гамма-спектрометрический, химический, петрографический, титриметрический и спектрофотометрический, а также электронно-зондовый микроанализ.

С помощью рентгенофазового анализа выявлены минералы шлаков, находящиеся в кристаллическом состоянии, определены структуры кристаллов минералов, подтверждено наличие аморфного состояния веществ. В составе отвалы и гранулированных доменных шлаков доказано присутствие минералов, ценных для про-

изводства вяжущих материалов: бреггита, ларнита, окерманита и псевдоволластонита. Рассчитана массовая доля стеклообразного компонента, составляющая половину массы доменного шлака ОАО «Запорожсталь» и металлургического шлака ПФНК производства сплава FeNi. Основным минеральным компонентом отвалы шлаков ПФНК и НЗФ является диоксид $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$, находящийся в кристаллическом и аморфном состояниях.

Химический анализ отвалы доменных шлаков показал незначительное присутствие в их составе тяжелых металлов, масс. %: Cu – 0,5; Ti – (0,1-0,36); Mn – (0,14-0,42); Fe – (0,23-0,8), что не представляет опасности при дальнейшей утилизации. Более высокое содержание тяжелых металлов в гранулированном доменном шлаке ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог», масс. %: Fe – 15,38; Mn – 5,8. В шлаках производства ферросплавов массовые доли тяжелых металлов следующие, %: Ti – (0,11-0,21); Mn – (0,19-0,91); Fe – (3,0-7,0); Cr – (0,23-0,65).

Морфологические особенности поверхности частиц гранулометрических фракций промышленных отходов, охарактеризованные методом растровой электронной микроскопии, позволили оценить сорбционную активность поверхности частиц и факторы на нее влияющие: степень разрыхления поверхности агломерата, количество частиц и их форму.

Гамма-спектрометрическим анализом выявлено присутствие в техногенных материалах естественных радионуклидов: ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K . Доказано соответствие исследованных отходов I классу радиационной опасности, определяющее отсутствие ограничений при использовании отходов в качестве технических материалов [3]. Установлено варьирование радиоактивности гранулометрических фракций промышленных отходов.

Сорбционная активность металлургических шлаков ПФНК и НЗФ исследована спектрофотометрическим методом при поглощении из водных растворов органических красителей: метиленового синего (МС), метилвиолета (МВ) и конго красного (КК) с определением статической обменной емкости (СОЕ).

Использование доменных шлаков в производстве вяжущих веществ. Доменные шлаки могут использоваться в производстве вяжущих материалов по двум основным направлениям: в качестве сырьевого компонента производства портландцементного клинкера и в производстве шлакопортландцемента при совместном помоле цементного клинкера и шлака [4]. Обоснованы принципы выбора направления использования отходов в производстве вяжущих материалов: отсутствие токсичных элементов, необходимое количественное соотношение оксидов элементов, соответствие шлаков рекомендациям модульной классификации и величинам коэффициентов качества и насыщения, наличие гидравлически активных минералов и аморфного состояния веществ, соответствие требованиям норм радиационной безопасности. В соответствии с оксидным, радионуклидным составом и величинами модулей отвальный доменный шлак ОАО «Запорожсталь» можно использовать по двум направлениям: без рассеивания на фракции как компонент сырьевой смеси производства портландцементного клинкера при частичной замене глинистого компонента; фракцию шлака >20 мм – в производстве радиационно безопасного шлакопортландцемента (ШПЦ). Как сырьевой компонент в производстве портландцемента вместо глины и при вторич-

ном использовании в производстве ШПЦ можно рекомендовать гранулометрическую фракцию шлака 2,5-5,0 мм ПАО «ММК имени Ильича». Отвальный доменный шлак ОАО ДМК можно рекомендовать как сырьевой компонент в производстве портландцемента и ШПЦ без предварительного его рассеивания на гранулометрические фракции. Отвальный доменный шлак и фракция >10 мм гранулированного шлака ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог» могут быть рекомендованы к практическому использованию по двум выше указанным направлениям производства вяжущих. Отвальный шлак также можно использовать как корректирующую железистую добавку к сырьевой смеси.

Сорбционные свойства металлургических шлаков на основе алюмосиликатов кальция и магния. Определены основные критерии использования шлаков в качестве сорбентов для очистки вод: отсутствие токсичных элементов, присутствие в составе алюмосиликатов кальция и магния, наличие аморфного состояния веществ, соответствие требованиям норм радиационной безопасности. Данным критериям соответствуют металлургические шлаки ПФНК и НЗФ и фракция >10 мм гранулированного доменного шлака ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог». Исследованные шлаки нетоксичные и при длительной эксплуатации не нарушают санитарно-гигиенических требований, предъявляемых к питьевой воде, что доказано отсутствием десорбции из шлаков токсичных соединений.

Подобраны режимы оптимальной химической активации шлаков в зависимости от природы сорбата. Для шлаков ПФНК и НЗФ оптимальна кислотная активация раствором 0,5 М H_2SO_4 , для шлака ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог» – предварительная обработка водой. Кислотная и щелочная активация диопсидового шлака могут использоваться в различных режимах сорбции органических красителей. На примере сорбции МВ диопсидовым шлаком показано, что кислотную активацию можно использовать в статических условиях. Щелочная активация целесообразна в условиях динамической сорбции

МВ с невысокой скоростью прохождения раствора через слой сорбента. Поверхности шлаков, модифицированные в процессе активации, в дальнейшем остаются стабильными при сорбции органических соединений из растворов различной кислотности. Увеличение СОЕ коррелирует с разрыхлением поверхности шлака. При активации различными химическими агентами растворяются определенные химические компоненты шлака.

Определена максимальная СОЕ шлака на основе диопсида по отношению к МС, КК, МВ в статических условиях. Доказано практическое отсутствие десорбции МС, КК, МВ. Порядок процесса сорбции МС диопсидовым шлаком меняется во времени и в зависимости от соотношения «МС : шлаковый сорбент». Высокие значения СОЕ, эффективности сорбции МС и наибольшая скорость их увеличения во времени отмечена при соотношении «МС : шлак» = 1 мг/г. Количественные показатели сорбции МС минералом диопсидом зависят от кислотности водной фазы. Уменьшение СОЕ и эффективности очистки растворов от МС с уменьшением pH определяется протонированием молекулы органического красителя.

References:

1. Sumatohina I.M. Promislovi vidhodi jak chinnik stanu ekologichnoï bezpeki regionu: ocinka, kartografuvannja, upravlinnja [Industrial wastes as a factor of the state of ecological safety in the region: assessment, mapping, management]., I.M. Sumatohina, N.M. Duk, O.A. Shevchenko., Ekologija dovkillja ta bezpeka zhittedijal'nosti [Ecology of environment and health safety]. – 2008., No. 1., pp. 69-75.
2. Taranov V.G. Geotekhnika, geojekologija i problema othodov [Geotechnics, geo-ecology and problem of wastes]., V.G. Taranov., Kommunal'noe hozjajstvo gorodov: nauch. tehnic. sb. [City municipal services: scientific and technical collection]., Issue 38. – Kiev., Tehnika [Technics], 2002., pp. 91-96.
3. Normy radiacionnoj bezopasnosti Ukrainy (NRBU-97) [Radiation safety standards of Ukraine]. – Kiev., MOZ, 1997. – 121 p.

4. Boott Ju.M. Portlandcementnyj klinker [Portland cement clinker], Ju.M. Boott, V.V. Timashev – Moskva., Strojizdat, 1967. – 303 p.

Литература:

1. Суматохіна І.М. Промислові відходи як чинник стану екологічної безпеки регіону: оцінка, картографування, управління., І.М. Суматохіна, Н.М. Дук, О.А. Шевченко., Екологія довкілля та безпека життєдіяльності. – 2008., № 1., С. 69-75.

2. Таранов В.Г. Геотехника, геоэкология и проблема отходов., В.Г.

Таранов., Коммунальное хозяйство городов: науч. технич. сб. – Вып. 38. – Киев., Техніка, 2002., С. 91-96.

3. Нормы радиационной безопасности Украины (НРБУ-97). – Киев., МОЗ, 1997. – 121 с.

4. Бутт Ю.М. Портландцементный клинкер., Ю.М. Бутт, В.В. Тимашев – Москва., Стройиздат, 1967. – 303 с.

Information about authors:

1. Elina Khobotova - Doctor of Chemistry, Full Professor, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city;

e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

2. Marina Ukhanyova - Postgraduate Student, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

3. Inna Grayvoronskaya - Postgraduate Student, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

4. Julia Kalmykova - Applicant, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

CHEMICAL AND ECOLOGICAL JUSTIFICATION OF UTILIZATION OF BLAST FURNACE SLAGS IN PRODUCTION OF THE BINDERS

E. Khobotova, Doctor of Chemistry, Full Professor
Ju. Kalmykova, Applicant
M. Ignatenko, Postgraduate Student
Kharkiv National Automobile and Highway University,
Ukraine

Authors have shown the correspondence of chemical properties and hydraulicity of blast furnace slags with the quantitative criteria of oxide composition and the system of modules determining their utilization as binders. It was shown that the slags are considered to belong to the first class of radiation danger.

Keywords: blast furnace slags, utilization, minerals, hydraulicity, binders.

Conference participants


ХИМИКО-ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ УТИЛИЗАЦИИ ДОМЕННЫХ ШЛАКОВ В ПРОИЗВОДСТВЕ ВЯЖУЩИХ МАТЕРИАЛОВ

Хоботова Э.Б., д-р хим. наук, проф.
Калмыкова Ю.С., соискатель
Игнатенко М.И., аспирант
Харьковский национальный автомобильно-дорожный
университет, Украина

Показано соответствие химических свойств и гидравлической активности доменных шлаков количественным критериям оксидного состава и системы модулей, которые определяют их утилизацию в качестве вяжущих материалов.

Ключевые слова: доменные шлаки, утилизация, минералы, гидравлическая активность, вяжущие материалы.

Участники конференции

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1181>

Доменные шлаки образуются на Дряде металлургических предприятий Украины и представляют собой многотоннажные отходы промышленности. В зависимости от скорости охлаждения шлаки делятся на гранулированные и отвалы. Гранулированные шлаки включают вещества в аморфном состоянии, обладают высокой химической и гидравлической активностью, поэтому их используют в производстве строительных материалов. Медленно охлажденные шлаки являются кристаллическими, чаще всего проявляют малую химическую активность и рекомендуются только как заполнители бетонов. Однако отвалы могут иметь широкий спектр минералов, в том числе включать гидравлически активные минералы, что определяется составом исходного сырья и технологическими условиями производства. Поэтому для каждого предприятия необходимо отдельное исследование их химического и минералогического состава, что тем более актуально для Украины, в которой ощущается дефицит сырья для производства вяжущих материалов.

Целью работы являлось повышение рациональности и комплексности использования твердых промышленных отходов за счет выявления полезных технических свойств доменных шлаков и обоснования их утилизации в качестве вяжущих материалов. Основными направлениями являются:

замена части сырьевого глинистого компонента в производстве портландцементного клинкера и использование шлака как компонента шлакопортландцемента (ШПЦ) при совместном помоле цементного клинкера и шлака.

Объекты исследования – отвалы доменных шлаков ОАО «Запорожсталь», ПАО «Мариупольский металлургический комбинат имени Ильича», ОАО Днепровский металлургический комбинат им. Ф. Э. Дзержинского (ОАО ДМК); ПАО Алчевский металлургический комбинат (АМК); отвалы и гранулированный доменный шлак ОАО «АрселорМиттал Кривой Рог». В работе обоснована эффективность практического использования доменных шлаков (отвалов и гранулированных) в производстве вяжущих материалов, что является актуальным в условиях нехватки кондиционного сырья в Украине. Направление утилизации определяется химическим элементарным и минералогическим составом шлаков.

Экспериментальные методы исследования химического состава и технических полезных свойств доменных шлаков: рентгенофазовый, петрографический, гамма-спектрометрический, электронно-зондовый микроанализ позволили определить минералогический, оксидный, радионуклидный и элементарный составы шлаков, оценить их гидравлическую активность по системе модулей и ве-

личинам коэффициентов качества КК и насыщения КН. Основные количественные критерии, характеризующие свойства шлаков, приведены в таблице 1. Разделение средних проб шлаков на фракции проводилось с помощью набора сит.

Радиоактивные свойства доменных шлаков. Гамма-спектрометрическим методом определены удельные активности естественных радионуклидов (C_{e}) и эффективные удельные активности ($C_{\text{эф}}$) гранулометрических фракций шлаков, которые рассчитывались по уравнению [1]

$$C_{\text{эф}} = C_{\text{Ra}} + 1,31C_{\text{Th}} + 0,085C_{\text{K}}, \text{ Бк}\cdot\text{кг}^{-1}.$$

В состав исследованных шлаков входят естественные радионуклиды: ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{40}K . Основной вклад в величину $C_{\text{эф}}$, практически во всех случаях вносит радионуклид ^{226}Ra , затем – ^{232}Th . Согласно величине $C_{\text{эф}}$ шлаки и их отдельные фракции относятся к первому классу радиационной опасности, для которого $C_{\text{эф}}$ не превышает величины 370 Бк/кг [1]. Подобные материалы могут использоваться в строительстве без ограничения.

Химико-минералогическое обоснование утилизации доменных шлаков в производстве цемента. Изученные доменные шлаки соответствуют ориентировочным требованиям, предъявляемым к химическому составу сырьевых гли-

Табл.1.

**Количественные критерии, определяющие утилизацию доменных шлаков
и их гранулометрических фракций в производстве вяжущих материалов**

Шлак металлургического предприятия	$M_o > 1,0$ [2]	$M_{гидр.}$ 1,7- 2,4 [3]	КК 1,65 – 1 сорт [4]	Сырьевой компонент производства портландцемента		Компонент ШПЦ		
				КН по Ли- Паркеру 85-100 [3]	КН по Кинду- Джангу 0,92-0,95 [3]	$SiO_2/$ $CaO+Al_2O_3$	M_a 3 сорт 0,12 [5]	КН 0,85-0,95 [5]
«Запорожсталь» отвальный доменный	1,38-1,99	1,93 фракция >20	1,8-2,35	Максимально для фракции >20	Максимально для фракции >20	Соот.	0,11-0,15	Максимально для фракции >20
ММК отвальный доменный	1,67-2,75	1,91 фракция <0,63	2,16-3,45	100 % фракция <2,5-5	Максимально для фракции 2,5-5	Соот.	0,12-0,19	1,0 фракция 2,5-5
ДМК отвальный доменный	1,69 средняя проба	1,68-1,82	2,05 средняя проба	70,5 % максимально для фракции <0,63	Не соот.	Соот.	Средняя проба	Не соот.
АМК отвальный доменный	1,66-3,42	1,82-1,97 фракция >5	2,14-5,3	167,3 % фракция >5	0,63-1,45; фракция >5 0,63-1,01	Соот.	0,14-0,21	90,4-167,3 фракция >5
«АрселорМиттал» отвальный доменный	1,33 средняя проба	Не соот.	3,46 средняя проба	81,72 % средняя проба	Не соот.	Соот.	0,12 средняя проба	0,88 средняя проба
«АрселорМиттал» гранулированный доменный шлак	2,19-5,94 фракция >10	2,01 фракция >10	2,74 фракция >10	78,44 % фракция >10	1,95 фракция >10 белого цвета	Соот.	0,11-0,17 фракция >10	0,74-2,2 фракция >10

нистых пород для производства портландцемента, включая массовые доли отдельных оксидов: MgO , K_2O , Na_2O и TiO_2 . Общим нежелательным свойством является пониженное (<8 %) содержание Al_2O_3 и превышение рекомендуемого массового вклада SO_3 (≤ 1 %). Исключение составляет средняя проба отвального доменного шлака «АрселорМиттал». Все шлаки основные по своей природе ($M_o > 1,0$).

Коэффициент качества КК исследованных шлаков превышает рекомендуемый предел. Значения гидравлического модуля $M_{гидр.}$ соответствуют оптимальным за исключением отвального доменного шлака «АрселорМиттал». Величины модулей глиноземного $M_{гидр.}$ и силикатного M_c укладываются в широкий оптимальный интервал. По величинам КН можно сделать рекомендации по использованию отдельных фракций шлаков или шлака в целом в качестве сырьевого глинистого компонента производства цементного клинкера, либо в качестве компонента ШПЦ.

Рекомендации по практической утилизации доменных шлаков в качестве сырьевого компонента цемент-

ного производства основываются на высоких оптимальных значениях показателей КК, КН по Ли-Паркеру и Кинду-Джангу и $M_{гидр.}$ (за исключением отвального доменного шлака «АрселорМиттал»). Рекомендованы к утилизации в производстве портландцементного клинкера при замене части глины без рассеивания на гранулометрические фракции отвальные доменные шлаки «Запорожсталь», ДМК, «АрселорМиттал»; отдельные фракции шлаков: 2,5-5,0 мм ММК, >5,0 мм АМК и >10 мм «АрселорМиттал». В качестве глинисто-железистой добавки может использоваться отвальный доменный шлак «АрселорМиттал».

Обобщение полученных количественных критериев показывает, что для большинства обследованных металлургических комбинатов возможна утилизация шлаков или отдельных их фракций в качестве компонентов ШПЦ. По качественному оксидному составу доменные шлаки полностью соответствуют составу портландцементного клинкера. Количественно близки к среднему для портландцементов массовые вклады кремнезема, глинозема и оксида магния. Чаше все-

го занижены массовые вклады CaO и Fe_2O_3 и наоборот – завышено содержание SO_3 . Для всех шлаков содержание SiO_2 ниже, чем суммарный массовый вклад CaO и Al_2O_3 , что характерно для состава портландцемента.

Кристаллическая часть отвальных доменных шлаков содержит гидравлически активные минералы в массовых долях 28,5-42 %, для фракций гранулированного шлака «АрселорМиттал» разброс значений больше – (9,5-43,6 %).

Согласно величине модуля активности M_a все шлаки относятся к 3 сорту шлаков. Оптимальные величины гидравлического модуля и КН характерны для каждого из шлаков или для их определенной фракций.

Соответствие оптимальным значениям критериев: M_a , $M_{гидр.}$ и КН (за исключением шлака ДМК) определяет направление утилизации доменных шлаков как компонентов ШПЦ.

Рекомендованы к утилизации в производстве ШПЦ без рассеивания на фракции отвальные доменные шлаки ДМК и «АрселорМиттал», а также отдельные гранулометрические фракции: >20 мм «Запорожсталь», 2,5-

5,0 мм ММК, >5 мм АМК и >10 мм «АрселорМиттал» (гранулированный шлак).

Полученные экспериментальные данные легли в основу производства радиационно-безопасных вяжущих материалов. **Способ производства радиационно-безопасного ШПЦ** может использоваться на цементных заводах при изготовлении продукции, предназначенной для сооружения зданий социального и жилого назначения. Сущность способа [6] состоит в совместном помоле шлакопортландцементного клинкера и отвального доменного шлака. Первоначальной стадией является выделение гранулометрической фракции доменного шлака, обладающей пониженными радиационными характеристиками. Для этого проводят рассев отвального доменного шлака на гранулометрические фракции и определяют их радиоактивные характеристики с помощью гамма-спектрометрического метода. Оптимальной считается та фракция шлака, которая имеет низкий уровень активности природных радионуклидов и включает гидравлически активные минералы, что определяется с помощью рентгенофазового анализа. В дальнейшем отобранные фракции используются вместо части глинистого компонента в процессе обжига сырьевой смеси для получения шлакопортландцементного клинкера. Полученный клинкер перемалывается совместно с отобранной фракцией шлака. Подобная совокупность технологических операций обеспечивает снижение удельной радиоактивности и способности к эманации изотопов радона ШПЦ, уменьшение доз внешнего гамма-излучения готового строительного материала и внутреннего облучения человека в шлакопортландбетонных зданиях.

Технологическая схема способа получения радиационно-безопасного ШПЦ представлена на рис. 1. Отвальный доменный шлак со склада шлака 1 поступает на сита 2, где осуществляется отбор наиболее радиационно-безопасной фракции шлака. Отобранная фракция сушится в сушилке 3 при температуре около 600 °С до остаточной влажности менее 1 %. Высушенный материал подается в сы-

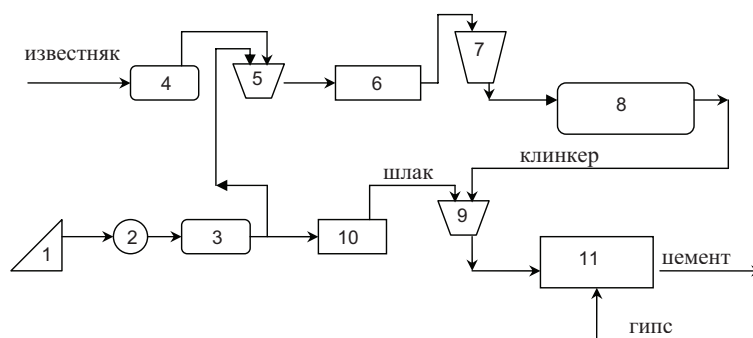


Рис. 1. Технологическая схема способа получения радиационно-безопасного ШПЦ с использованием отвального доменного шлака: 1 – склад шлака; 2 – сита; 3, 4 – сушилка; 5 – сырьевой цех; 6 – шаровая мельница; 7 – смесительные силосы; 8 – печь обжига; 9 – клинкерный склад; 10 – дробилка, 11 – цех помола клинкера

рьевой цех 5, где шлак используется как глинистый компонент сырьевой смеси. Туда же подается высушенный в сушилке 4 известняк. После дозирования сухой шлак и известняк подвергаются совместному помолу в сырьевую муку в шаровой мельнице 6. Тщательно перемешанная и откорректированная в смесительных силосах 7 сырьевая мука поступает во вращающую печь 8, где осуществляется обжиг сырьевой смеси с получением портландцементного клинкера. Клинкер временно складывается на складе 9. Далее клинкер с гипсом и высушенным и измельченным в дробилке 10 отвальным шлаком поступают в цех помола клинкера 11 для приготовления ШПЦ. Последний измельчается до остатка менее 15 % на сите № 008, что отвечает удельной поверхности 3000 см²/г.

Предложенный способ обеспечивает снижение удельной радиоактивности и способности к эманации изотопов радона ШПЦ, уменьшение доз гамма-излучения готового строительного материала и внутреннего облучения человека, разрешает экологические проблемы при вторичном использовании отвальных шлаков, направлен на сокращение топливно-энергетических затрат и повышение эффективности производства ШПЦ.

Выводы

- Показана целесообразность обоснования направления практической утилизации доменных шлаков в производстве вяжущих веществ по количественным критериям: в каче-

стве сырьевого компонента цементного производства – по оптимальным значениям КК, КН по Ли-Паркеру и Кинду-Джангу и $M_{гидр.}$; в качестве компонентов ШПЦ – по оптимальным значениям КН, $M_{гидр.}$, M_a .

- Рекомендованы к утилизации в качестве сырьевого компонента вместо глины в производстве портландцементного клинкера без рассеивания на гранулометрические фракции отвальные доменные шлаки «Запорожсталь», ДМК, «АрселорМиттал», а также гранулометрические фракции шлаков: 2,5-5,0 мм ММК, >5,0 мм АМК и >10 мм «АрселорМиттал». Показано, что отвальный доменный шлак «АрселорМиттал» может использоваться в качестве глинисто-железистой добавки.

- Обоснована утилизация как компонента ШПЦ отвальных доменных шлаков ДМК и «АрселорМиттал» без рассеивания на фракции, а также гранулометрических фракций: >20 мм «Запорожсталь», 2,5-5,0 мм ММК, >5 мм АМК и >10 мм «АрселорМиттал» (гранулированный шлак).

- Экспериментально доказана принадлежность доменных шлаков к I классу радиационной опасности, что позволяет утилизировать их в строительстве без ограничения.

- Разработан способ производства радиационно-безопасного шлакопортландцемента.

References:

- Normy radiacionnoj bezopasnosti Ukrainy (NRBU-97) i

osnovnye sanitarnye pravila raboty s radioaktivnymi veshchestvami i drugimi istochnikami ionizirovannyh izlucheniij [Radiation safety standards of Ukraine (SRSU-97) and the basic health-related regulations of work with radioactive materials and other sources of the ionized radiations]. – Kiev., 1998. – 159 p.

2. Perepilicyn V.A. Osnovy tekhnicheskoy mineralogii i petrografii [Fundamentals of technical mineralogy and petrography]. – Moskva., Nedra, 1987. – 255 p.

3. Kuzhvart M. Nemetallicheskie poleznye iskopaemye [Nonmetallic minerals]. – Moskva., Mir, 1986. – 472 p.

4. GOST 3476-74 «Shlaki domennye i jelektrotermofosforne granulirovannye dlja proizvodstva cementov» [«Blast-furnace slags and electro-thermophosphoric granulated slags for production of cements»].

5. Spravochnik po proizvodstvu cementa., pod red. Holina I.I. [Reference book on production of cement, edited by Holina I.I.] – Moskva., Gosstrojizdat, 1963. – 851 p.

6. Patent UA 41223 U, МПК S04B7/14 (2009.01). Sposib

vigotvorenja radiacijno bezpechnogo shlakoportlandcementu z vikoristannjam vidval'nogo domennogo shlaku [A way of production of radiation safe Portland blast-furnace cement with the use of dump blast-furnace slag]., E.B. Hobotova, M.I. Uhan'ova, Ju.S. Kalmikova; KHNAHU owner. – Application U 2008 14552 from 17.12.2008; issued 12.05.2009; Bulletin No. 9.

Литература:

1. Нормы радиационной безопасности Украины (НРБУ-97) и основные санитарные правила работы с радиоактивными веществами и другими источниками ионизированных излучений. – Киев., 1998. – 159 с.

2. Перепилицын В.А. Основы технической минералогии и петрографии. – Москва., Недра, 1987. – 255 с.

3. Кужварт М. Неметаллические полезные ископаемые. – Москва., Мир, 1986. – 472 с.

4. ГОСТ 3476-74 «Шлаки доменные и электротермофосфорные гранулированные для производства цемента».

5. Справочник по производству цемента., под ред. Холина И.И. – Москва., Госстройиздат, 1963. – 851 с.

6. Патент UA 41223 U, МПК S04B7/14 (2009.01). Спосіб виготовлення радіаційно безпечного шлакопортландцементу з використанням відвального доменного шлаку., Е.Б. Хоботова, М.І. Уханьова, Ю.С. Калмикова; власник ХНАДУ. – Заявка U 2008 14552 від 17.12.2008; опубл. 12.05.2009; Бюл. № 9.

Information about authors:

1. Elina Khobotova - Doctor of Chemistry, Full Professor, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

2. Julia Kalmykova – Applicant, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

3. Marina Ignatenko - Postgraduate Student, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

CHEMICAL PROCESSES OF ABIOTIC OIL FORMATION

G. Simonian, Candidate of Chemistry, Associate Professor
Yerevan State University, Armenia

Numerous theoretical and experimental works regarding the theory of abiotic formation of oil and gas, including those written in recent years by various authors, are considered in the article. The equations of chemical reactions for every hypothesis of abiotic oil formation are given. It is shown that the oil is formed in the bowels of the Earth from the deep mantle fluids and is a renewable resource.

Keywords: oil, genesis of oil, abiotic oil, chemical processes of oil formation.

Conference participant, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ АБИОГЕННОЙ НЕФТИ

Симонян Г.С., канд. хим. наук, доцент
Ереванский государственный университет,
Ереван, Армения

В статье обсуждаются многочисленные теоретические и экспериментальные работы, в том числе последних лет, различных авторов, касающиеся теорий абиогенного образования нефти и газа. Приведены уравнения химических реакции каждой гипотезы абиогенного образования нефти. Показано, что нефть образуется в недрах Земли из глубинных мантийных флюидов и является возобновляемым ресурсом.

Ключевые слова: нефть, генезис нефти, абиогенная нефть, химические процессы нефтеобразования.

Участник конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1182>

Нефть представляет собой смесь низко- и высокомолекулярных соединений, относящихся к различным гомологическим рядам. Низкомолекулярные соединения представляют собой, в основном, парафиновые, нафтено-парафиновые и ароматические углеводороды. Высокомолекулярная часть нефти состоит из высокомолекулярных парафиновых углеводородов, моно- и конденсированных нафтено-парафиновых, моно- и бициклических ароматических углеводородов ряда бензола и нафталина, смол и асфальтенов. Таким образом, нефть – это сложная многокомпонентная смесь, которая в зависимости от внешних условий проявляет свойства молекулярного раствора или дисперсной системы. В составе нефти обнаружено свыше 1000 индивидуальных органических веществ, содержащих: углерод, водород, кислород, азот, серу и более 60 элементов.

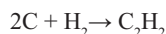
В настоящее время существуют многочисленные теории о происхождении нефти, однако основными из них являются - органического (биогенного) [1] и неорганического (абиогенного) происхождения [2].

Сторонники биогенной гипотезы считают, что источниками происхождения нефти были остатки растений и животных, скопившихся в течение многих миллионов лет на дне водоемов в прошлые геологические эпохи [1]. Мы придерживаемся абиогенной теории образования нафтидов глубинными мантийными флюидами. В работе [3] нами подробно анализи-

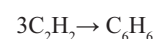
рована несостоятельность биогенной теории образования нефти. Целью данной работы является обсуждение химических процессов при образовании абиогенной нефти.

Впервые теория абиогенного происхождения нефти предложена в 1805 году немецким естествоиспытателем Александром Гумбольдом. Он высказал предположение, что нефть образуется на больших глубинах в магматических породах. Гумбольд наблюдал, как нефть сочилась из таких пород в Южной Америке, Венесуэле.

В 1866 году французский химик Марселен Бертло высказал предположение, что нефть образовалась в недрах Земли из минеральных веществ. После долгих поисков Бертло удалось синтезировать ацетилен из углерода и водорода в условиях высокой температуры вольтовой дуги.

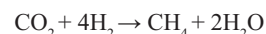
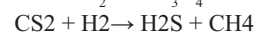
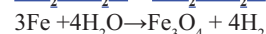


Он обнаружил, что газ ацетилен (ненасыщенный углеводород- C_2H_2) при низких температурах может переходить в тяжёлые углеводороды. В подтверждение своей теории он провел несколько экспериментов, искусственно синтезировав углеводороды из неорганических веществ. Синтез ацетилена и получение при его пиролизе бензола, а также других ароматических углеводородов (например, стирола, нафталина) стали экспериментальным обоснованием ацетиленовой теории Бертло.



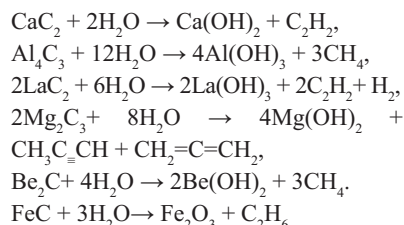
На этом основании он сделал вывод о том, что так образовались углеводородные соединения метеоритов и что, по-видимому, подобное происхождение имеют углеводороды на других планетах.

А французский химик Г. Биассон в 1871 году высказал идею о происхождении нефти путем взаимодействия воды, CO_2 и H_2S с раскаленным железом. Эксперименты по неорганическому синтезу углеводородов, проведенные этими исследователями, в значительной степени способствовали развитию гипотезы минерального происхождения нефти.



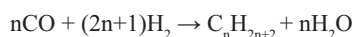
В 1877 г. на заседании Русского химического общества с изложением «минеральной» (карбидной) гипотезы происхождения нефти выступил Дмитрий Иванович Менделеев. Опираясь на конкретные геологические и химические факты, Менделеев писал: «... Образование нефти... более вероятно приписать действию воды, проникающей чрез трещины, образовавшиеся при подъёме гор, в глубь земли, до того металлосодержащего накалившегося ядра земли, которое необходимо признать во внутренности земной...» [4]. По его мнению, вода проникала

вглубь земли по трещинам в осадочных и кристаллических породах до магмы, где реагировала с карбидами тяжелых металлов, образуя углеводороды:



В 1892 г. русский учёный Соколов В.Д. предложил так называемую, «космическую» гипотезу [5], согласно которой углеводороды нефти образованы из углерода и водорода в эпоху формирования Земли и других планет. По мере охлаждения Земли углеводороды поглощались ею и конденсировались в земной коре. Впоследствии, когда образовалась земная кора, из магмы выделялись углеводороды, которые по трещинам в земной коре поднимались в верхние части, сгущались и там образовали скопления. В доказательство своей теории Соколов приводил факты обнаружения углеводородов в метеоритах

В наше время выдвинут целый ряд других гипотез о неорганическом происхождении нефти и газа в недрах Земли в результате химических реакций непосредственно из углерода и водорода в условиях высоких температур, давлений и каталитического действия оксидов металлов (Fe, Ni и др.). В основном все гипотезы неорганического происхождения нефти и газа базируются на следующих основных положениях: синтез углеводородов возможен на основе оксидов углерода и водорода, которые в тех или иных количествах присутствуют во флюидах, поступающих из недр земли:

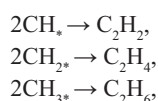


в процессе Фишера-Тропша среди побочных продуктов образуется CO_2 . Степень протекания побочных реакций существенно зависит от природы катализатора и температуры процесса.

В середине XX века возрождаются различные гипотезы абиогенного (космического, вулканического и маг-

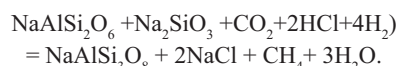
матогенного) происхождения нефти.

Николай Александрович Кудрявцев выдвинул магматическую гипотезу образования нефти [1]. В мантии Земли - в условиях очень высокой температуры углерод и водород образуют углеводородные радикалы – CH , CH_2 и CH_3 . По мере понижения температуры в верхних слоях эти радикалы соединяются друг с другом и с водородом.

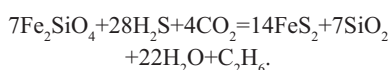


Но Кудрявцев обходит стороной вопрос, откуда, собственно, берется в этих радикалах водород. А.А. Воробьев выдвинул предположение, что в развитии нашей планеты немалую роль играли именно электрические процессы [6]. В результате сильных электрических разрядов возникают частицы плазмы, которые обладают высокой химической активностью. Это обстоятельство, в свою очередь, создает предпосылки для протекания таких реакций, которые невозможны при обычных условиях. По мнению Воробьева, метан при воздействии подземного электрического разряда может подвергнуться частичному дегидрированию, образуются свободные углеводородные радикалы – CH , CH_2 и CH_3 .

Александр Александрович Макарушев показал, что залежи солей и нефти в осадочных депрессиях пассивных континентальных окраин порождаются глубинными магматическими очагами на щелочной стадии их развития [7].



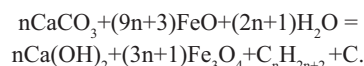
Показано, что Fe_2SiO_4 подвергается флюидной сульфуризации с генерацией сульфидных расплавов. Вовлечение в этот процесс оксидов углерода (CO_2 , CO) порождает углеводороды:



Подобными процессами определяется наблюдаемая пространствен-

ная связь углеводородов и сульфидных руд. Ими вносится существенный вклад в углеводородную специализацию депрессионных структур срединно-океанических хребтов [8].

В работах [9,10] показано, что в мантийных условиях из FeO (вюстит), CaCO_3 (кальцита) и вода, наряду с углеродом обнаруживаются также углеводороды, по реакции:

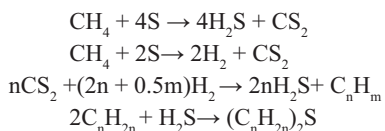


Дмитрий Николаевич Тимофеев предполагает, что в нижней мантии от тепла ядра Земли, в результате распада карбидов, нитридов, гидридов и оксидов образуются газообразные соединения NO , N_2O , N_2O_4 , N_2O_5 , HCN , O_3 , N_2H_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , HN_3 . При поднятии этих газообразных соединений, давление в них снижается, газы расширяются, из-за этого охлаждаются, и в условиях астеносферы по термодинамическим характеристикам элементы этих газов наиболее стабильны в виде соединений с большим молекулярным весом, которые получили название нитронефть. В мантии также синтезируются металлоорганические соединения, органосилоксаны, карбонилы, которые растворяются в нитронефти. В нитронефти присутствуют непереломные углеводороды, перекиси, амины, гидразин, озон и нитропарафины (нитрометан, гексанитроэтан и т.д.), нитроароматические соединения (тринитротолуол, гексанитробензол и т.д.), нитроамины (гексоген- $\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$, октоген- $\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_8\text{O}_8$), карбонилы Fe(CO)_5 , Ni(CO)_4 , металлоорганические соединения, кремнеорганические соединения (органосилоксаны), сера, SO_3 .

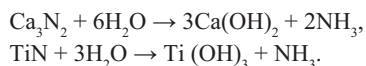
При поднятии нитронефти до глубин менее 10 км, нитронефть разлагается с образованием нефти, воды, N_2 , CO_2 рудных образований, гипсов и известняков. В случае избытка водорода в составе нитронефти происходит образование природного газа. При избытке кислорода нитронефть разлагается без образования углеводородов [11].

Михаил Абрамович Лурье и Федор Карлович Шмидт утверждают, что сера принимает участие в образова-

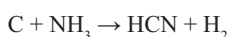
нии нефти уже на начальных стадиях нефтегенеза, согласуется с данными о ее наличии в глубинных флюидах в виде H_2S и S [12]. Показано, что взаимодействие CH_4 с S при мантийных условиях приводит к образованию различных S -содержащих соединений и более высокомолекулярных углеводородов.



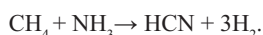
Нами принимается, что азот, являясь одним из основных компонентов нефти, принимает участие в образовании нефти во всех стадиях нефтегенеза [1,13,14]. Так, по расчетам Сорохтина [15] в мантии количество азота приблизительно $4,07 \cdot 10^{21}$ г. В мантийных условиях возможны существования некоторых нитридов. Вода, проникая в глубь земли по трещинам в осадочных и кристаллических породах до магмы, реагирует с нитридами тяжелых металлов, образует аммиак:



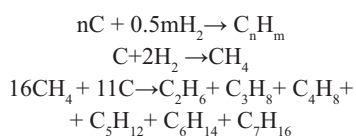
При 1000 °C аммиак реагирует с углём, образуя синильную кислоту HCN и частично разлагаясь на азот и водород:



Непосредственное образование цианистого водорода из метана и аммиака основано на эндотермической реакции:

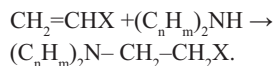


УВ могут синтезироваться и прямым взаимодействием углерода с водородом по реакции:



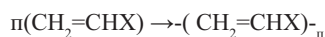
Как уже показано, в мантийных условиях возможно образование радикалов и бирадикалов (CH_3 , NH_2 , CH_2 ,

NH). Взаимодействия образующихся радикалов с метаном и аммиаком приводят к получению алкиламинов, которые взаимодействуют с олефинами.

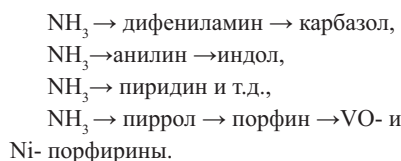


Этой реакцией объясняется отсутствие олефинов в подавляющем большинстве нефти.

Следует отметить, что в присутствии алкиламинов с пероксидами происходит полимеризация алкенов, с образованием высокомолекулярных веществ.



Из газообразных мантийных флюидов получают почти все азотистые соединения, входящие в состав нефти [16]:



Порфириновые комплексы нефти обладают каталитической активностью. Они играют определенную роль в процессе генезиса нефти. Ванадилпорфириновые комплексы стимулируют эпексидирование в процессе окисгенирования олефинов. Никелопорфирины участвуют в образовании метана и других углеводородов, а также они играют определенную роль в реакциях диспропорционирования водорода в процессе генезиса нефти.

Таким образом, показано, что нефть образуется в недрах Земли из глубинных мантийных флюидов и является возобновляемым ресурсом. Мы, сторонники абиогенной теории образования нефти, смотрим в будущее с оптимизмом. Мы полагаем, что запасов нефти и газа нам хватит еще на долгие столетия.

References:

1. Kudrjavcev N.A. *Genesis of oil and gas*. - Leningrad., Nedra, 1973. - 216 p.
2. Gubkin I.M. *Uchenie o nefi*

[The teaching about oil]. - Moskva., Nauka [Science], Issue 3, 1975., pp. 300-328.

3. Simonjan G.S., Pirumjan G.P. *Rol' azota v genezise nefi* [The role of nitrogen in the genesis of oil]. *Sborniki nauchnyh trudov «Fundamental'nye i prikladnye problemy nauki»* [Collections of scientific works «Fundamental and Applied Problems of Science»]. - Moskva., RAS, 2013., pp. 142-152.

4. Mendelev D.I. *Sochinenija* [Compositions]. - Leningrad-Moskva., AN SSSR, 1949, Vol. 10., pp. 302-310.

5. Sokolov V.D. *Kosmicheskoe proishozhdenie bitumov* [Space origin of bitumens]. - Bulletin MOIP, VIII, nov. ser. - 1889.

6. Vorob'ev A.A. *Fizicheskie uslovija zaleganiya i svojstva glubinnogo veshhestva* [Physical conditions of a bedding and properties of deeply lying substances]. (Vysokie jelektricheskie polja v zemnyh nedrah) [(Strong electric fields in bowels of the Earth)]. - Tomsk., TGU. - 1975.

7. Marakushev A.A., Marakushev S.A. *Obrazovanie nefityanj i gazovyh mestorozhdenij* [Formation of oil and gas fields]., *Litologija i poleznye iskopaemye* [Lithology and minerals]. - 2008, No. 5., pp. 505-521. <http://dx.doi.org/10.1134/S0024490208050039>

8. Marakushev A.A., Panejah N.A., Marakushev S.A. *Obrazovanie sul'fidnyh rud i uglevodorodov v sredinno-okeanicheskikh hrebtah* [Formation of sulphidic ores and hydrocarbons in mid-ocean ridges]. *Elektronnyj zhurnal «Glubinnaja nef't»* [E-journal «Deep-laid Oil»]. Vol. 2., No. 5., 2014., pp. 689-698.

9. Alekseev V.A., Djuzheva T.I., Mel'nik N.N. *Vodorodno-uglerodnaja degazacija Zemli i obrazovanie melkodispersnogo ugleroda pri vysokih davlenijah i temperaturah* [Hydrogen-carbon decontamination of Earth and formation of fine-dispersed carbon at high pressures and temperatures]. *Degazacija Zemli: geotektonika, geodinamika, geomorfologija, nef't, gaz, uglevodorody i zhizn'* [Decontamination of Earth: geo-tectonics, geodynamics, geomorphology, oil, gas, hydrocarbons and life]. October 10-22, 2010. - Moskva, GEOS. - 2010., pp. 21-22.

10. Kuchеров V.G., Bendeliani

N.A., Alekseev V.A., Kennej D.F. Sintez uglevodorodov izmineralov pri davlenii do 5 GPa [Synthesis of hydrocarbons from izminerals at the pressure of up to 5 GPa]., Reports of RAS. - 2002, Vol. 387, No. 6., pp. 789-792.

11. Timofeev D.N. Struktura mantii Zemli i sintez uglevodorodov v svete teorii himicheskikh processov [Structure of the Earth's mantle and synthesis of hydrocarbons in the light of the theory of chemical processes]. Elektronnyy zhurnal «Glubinnaya neft'» [E-journal «Deep-laid Oil»], Vol. 2., No. 9. - 2014., pp. 1455-1469.

12. Lur'e M.A., Shmidt F.K.O svyazi soderzhaniya sery i drugih harakteristik nefti [On connection of the Sulfur content with other characteristics of oil]. Abiogenyy vklad v nefteobrazovanie [Abiogenous contribution into oil formation]., Himija i tehnologija topliv i masel [Chemistry and technology of fuels and oils]. - 2007., No. 4., pp. 3-6.

13. Simonjan G.S. Rol' mantijnogo azota v nefteobrazovanii [The role of mantle nitrogen in oil formation]. 2-e Kudrjavcevskie Chtenija. Materialy

Vserossijskoj konferencii po glubinnomu genezisu nefti i gaza [Materials of the All-Russian conference on deep genesis of oil and gas]. - Moskva., CGJe., 2013., pp. 293-296.

14. Simonjan G.S. Rol' metalporfirinov nikelja i vanadija v abiogenom obrazovanii nefti [The role of metal-porphyrines of nickel and vanadium in the abiotic formation of oil]., Sovremennye naukoemkie tehnologii [Modern science-intense technologies]. - 2015, No. 9

15. Sorohtin O.G., Ushakov S.A. Razvitie Zemli [Development of Earth]. - Moskva., MGU, 2002. - 506 p.

16. Nesmijanov A.N., Nesmijanov N.A. Nachala Organicheskoy himii [Foundations of organic chemistry]. - Moskva., Himija. - 1970, Vol. 2. - 824 p.

Литература:

1. Кудрявцев Н.А. Генезис нефти и газа. - Ленинград., Недра, 1973. - 216 с.

2. Губкин И.М. Учение о нефти. - Москва., Наука, издание третье, 1975, с. 300-328.

3. Симонян Г.С., Пирумян Г.П. Роль азота в генезисе нефти. Сборники научных трудов «Фундаментальные и прикладные проблемы науки». - Москва., РАН, 2013, с. 142-152.

4. Менделеев Д.И. Сочинения.- Ленинград-Москва., АН СССР, 1949, т. 10, с. 302-310.

5. Соколов В.Д. Космическое происхождение битумов. - Бюллетень МОИП, VIII, нов. сер., 1889.

6. Воробьев А.А. Физические условия залегания и свойства глубинного вещества. (Высокие электрические поля в земных недрах). - Томск., ТГУ, 1975.

7. Маракушев А.А., Маракушев С.А. Образование нефтяных и газовых месторождений., Литология и полезные ископаемые, 2008, № 5, с. 505-521. <http://dx.doi.org/10.1134/S0024490208050039>

8. Маракушев А.А., Панеях Н.А., Маракушев С.А. Образование сульфидных руд и углеводородов в срединно-океанических хребтах. Электронный журнал «Глубинная нефть». Том 2., № 5., 2014., с. 689-698.

9. Алексеев В.А., Дюжева Т.И., Мельник Н.Н. Водородно-углеродная дегазация Земли и образование мелкодисперсного углерода при высоких давлениях и температурах. Дегазация Земли: геотектоника, геодинамика, геоморфология, нефть, газ, углеводороды и жизнь. 10-22 октября 2010. - Москва, ГЕОС, 2010, с. 21-22.

10. Кучеров В.Г., Бенделиани Н.А., Алексеев В.А., Кенней Д.Ф. Синтез

углеводородов изминералов при давлении до 5 ГПа., Доклады РАН, 2002, т. 387, № 6, с. 789-792.

11. Тимофеев Д.Н. Структура мантии Земли и синтез углеводородов в свете теории химических процессов. Электронный журнал «Глубинная нефть», Том 2., № 9., 2014., с. 1455-1469.

12. Лурье М.А., Шмидт Ф.К.О связи содержания серы и других характеристик нефти. Абиогенный вклад в нефтеобразование., Химия и технология топлив и масел. - 2007., № 4., с. 3-6.

13. Симонян Г.С. Роль мантийного азота в нефтеобразовании. 2-е Кудрявцевские Чтения. Материалы Всероссийской конференции по глубинному генезису нефти и газа. - Москва., ЦГЭ, 2013., с. 293-296.

14. Симонян Г.С. Роль металлопорфиринов никеля и ванадия в абиогенном образовании нефти., Современные наукоемкие технологии. - 2015, № 9

15. Сорохтин О.Г., Ушаков С.А. Развитие Земли. - Москва., МГУ, 2002. - 506 с.

16. Несмиянов А.Н., Несмиянов Н.А. Начала Органической химии. - Москва., Химия, 1970, т. 2. - 824 с.

Information about author:

1. Geworg Simonian - Candidate of Chemistry, Associate Professor; Yerevan State University; address: Armenia, Yerevan city; e-mail: sim-gev@mail.ru

AMINES REACTIVITY CRITERIA

G. Simonian, Candidate of Chemistry, Associate Professor
Yerevan State University, Armenia

The parameters characterizing the reactivity of amines in non-radical and radical reactions which are often used in the correlation analysis are discussed. It is shown that the ionization potential of amine I correlates with the basicity of pKB, with affinity of the amine to the proton in the gas phase (PA)g, with anodic oxidation potential of amine relative to a saturated calomel electrode EP, with Svein-Scott nucleophilicity parameter n, with dipole moment μ , with Taft's substituent constant σ and with nitrogen charge in the molecule of amine qN. In order to express the activity of the secondary amine in the reactions with the unsaturated compounds for the first time the multi-parameter empirical correlation equation, including ionization potential of amine, its basicity, steric factor of deputy and the dipole moment, is offered

Keywords: parameters of amines, amines, ionization potential, basicity, correlation, the Michael's reaction, multi-parameter equation.

Conference participant, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship


КРИТЕРИИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АМИНОВ

Симонян Г.С., канд. хим. наук, доцент
Ереванский государственный университет, Армения

Обсуждаются параметры, которые характеризуют реакционную способность аминов в нерадикальных и радикальных реакциях и часто применяются в корреляционном анализе. Показано, что потенциал ионизации амина I коррелируется с основностью pKB, с сродством амина к протону в газовой фазе (PA)g, с потенциалом анодного окисления амина по отношению к насыщенному каломельному электроду EP, с параметром нуклеофильности Свейна-Скотта n, дипольным моментом μ , константой заместителя Тафта σ и зарядом азота в молекуле амина qN. Для выражения активности вторичного амина в реакциях с ненасыщенными соединениями впервые предложено многопараметровое эмпирическое корреляционное уравнение, включающее потенциал ионизации амина, его основность, стерический фактор заместителя и дипольный момент.

Ключевые слова: параметры аминов, амины, потенциал ионизации, основность, корреляция, реакция Михаэля. многопараметровое уравнение.

Участник конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1183>

Амины — органические соединения, являющиеся производными аммиака, в молекуле которого один, два или три атома водорода замещены на углеводородные радикалы.

Целью данной работы является представить и обсудить те параметры аминов, которые часто применяются в корреляционном анализе и характеризуют их реакционную способность в нерадикальных и радикальных реакциях.

Важным структурным параметром аминов является потенциал ионизации (I), который связан с реакционным центром амина с атомом азота. В работах [1-3] установлена корреляция между потенциалом ионизации аминов и логарифмом констант скорости первичного акта их окисления персульфатом калия, пероксидом бензоила и гидропероксидом кумола в водных и неводных растворах. Интересно то, что реакции с участием аминов, для которых $I > 8$ эВ, протекают преимущественно по нерадикальному механизму, для них $dlgK/dI > 0$, а в случае аминов с $I < 8$ эВ, $dlgK/dI < 0$ и преимущественно реализуется радикальный механизм их окисления.

Амины характеризуются также основностью ($pK_b = -lgK_b$, где K_b — константа ионизации амина в воде при 298K). Так, в 1924 г. Бренстедом и Педерсоном [4] были предложены урав-

нения, согласно которым константы скорости реакций, подверженных общему кислотному или основному катализу, определяются константами диссоциации катализирующих кислот или оснований. Эта зависимость, известная под названием уравнение Бренстеда, записывается следующим образом: для кислот:

$$k_{HA} = G_A(K_{HA})^{\alpha} \text{ или } lgk_{HA} = lgG_A + \alpha lgK_{HA}$$

для оснований: $k_B = G_B(K_B)^{\beta}$ или $lgk_B = lgG_B + \beta lgK_B$

Здесь $k_{HA}(K_B)$ — каталитическая константа, полученная при использовании данной кислоты (основания). $K_{HA}(K_B)$ — константа ионизации этой же кислоты (основания); G_A (G_B) и $\alpha(\beta)$ — эмпирические константы характерны рассматриваемой каталитической реакции.

В 1953 г. Свеном и Скотом [6] было предложено уравнение, альтернативное обобщенному уравнению Бренстеда.

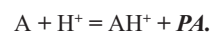
$$lgk = lgk_0 + Sn$$

Где k и k_0 — константы скорости реакции между электрофилом S и данным (N) или стандартом (N_0) нуклеофилами; n и S — постоянные, характеризующие нуклеофильность

нуклеофила и чувствительность S к изменению нуклеофильности атакующего агента. Для стандартного нуклеофила (H_2O) $n=0$. За стандартный электрофил берется CH_3Br , для которого условно $S = 1$. $lg \frac{k}{k_0} = n$, где

n относится к константе гидролиза CH_3Br , при 298 K.

(PA)g — сродство амина к протону в газовой фазе, (в кДж/моль) получен методом ион-циклотронного резонанса [7]. (PA)g представляет собой тепловой эффект реакции



Параметры $I, pK_b, (PA)g, E_p, n$ взяты из работы [2], μ из книги [5]. ПП-пиперидин, МФ-морфолин.

E_p — потенциал анодного окисления амина в ацетонитриле по отношению к насыщенному каломельному электроду [8].

Как видно из табл.1, величины I закономерно убывают в ряду $RNH_2 \rightarrow R_2NH \rightarrow R_3N$, в то время для других параметров эта закономерность не так четко выражена или нарушается. Например, основность вторичных аминов в водных растворах больше, чем основность первичных и третичных аминов. Одной из причин этого несоответствия является разная

Табл. 1.

Параметры амина

№	Амин	I	pK _B	(PA) _g	E _p	n	μ	q _N
1	CH ₃ NH ₂	8,97	3,38	877,0	-	5,21	1,46	-
2	C ₂ H ₅ NH ₂	8,86	3,27	888,2	-	4,93	1,28	-0,038
3	n-C ₃ H ₇ NH ₂	8,78	3,47	893,3	1,63	4,95	1,33	-0,037
4	и- C ₃ H ₇ NH ₂	8,72	3,37	897,4	-	4,68	1,2	-
5	n-C ₄ H ₉ NH ₂	8,68	3,22	895,8	1,63	5,04	1,4	-0,035
6	и-С ₄ H ₉ NH ₂	8,63	3,34	-	1,62	4,99	1,28	-
7	n-C ₆ H ₁₃ NH ₂	8,63	3,37	-	-	-	1,4	-0,036
8	n-C ₁₀ H ₂₁ NH ₂	8,63	3,37	-	1,72	-	1,41	-0,036
9	HOС ₂ H ₄ NH ₂	-	4,5	-	-	-	2,27	-0,033
10	C ₆ H ₅ NH ₂	7,7	9,42	-	-	-	1,5	0,051
11	(CH ₃) ₂ NH	8,24	3,27	905,4	-	5,63	1,17	-
12	(C ₂ H ₅) ₂ NH	8,01	2,91	927,1	1,4	4,75	1,2	-0,072
13	(C ₃ H ₇) ₂ NH	7,84	3,05	944,7	1,26	4,75	1,07	-0,072
14	(C ₄ H ₉) ₂ NH	7,69	2,70	-	1,31	4,27	1,04	-0,070
15	C ₂ H ₅ NHCH ₃	8,12	3,15	-	-	-	-	-
16	(HOС ₂ H ₄) ₂ NH	6,0	5,3	-	-	-	2,81	-0,058
17	ПП	8,7	2,88	-	-	5,59	1,2	-0,061
18	МФ	8,5	5,67	-	-	5,29	1,54	-0,053
19	(CH ₃) ₃ N	7,82	4,19	925	1,29	6,01	0,86	-
20	(C ₂ H ₅) ₃ N	7,5	3,22	953	1,19	4,05	0,78	-0,08
21	(C ₃ H ₇) ₃ N	7,3	3,17	962,5	1,02	-	0,74	-0,076
22	(C ₄ H ₉) ₃ N	7,15	-	-	-	-	0,78	-0,075
23	(C ₂ H ₅) ₂ NCH ₃	7,63	3,25	-	-	-	-	-
24	C ₂ H ₅ N(CH ₃) ₂	7,74	3,3	-	-	5,44	-	-

стабильность соответствующих гидратированных сопряженных кислот. Исходя из вышесказанного, наилучшую корреляцию между *I* и другими параметрами можно ожидать, когда первичные, вторичные и третичные амины рассматриваются в отдельности.

С помощью компьютерной программы “Origin-6” сделан анализ ли-

нейной зависимости $I = a + b X$ (*I*), где *X*-(PA)_g, *E_p*, *n*, *K_B*, *σ* - функция Тафта и *q_N*.

Решение уравнения 1, показывает, что когда первичные, вторичные и третичные амины обсуждаются в совокупности, получается хорошая корреляция между *I* с (PA)_g и *E_p* (табл.2)

Корреляция между *I* и *n*, *pK_B* не-

удовлетворительна, однако когда первичные, вторичные и третичные амины рассматриваются в отдельности, в отдельных случаях получаются хорошие корреляции:

В таблице 1 приведены также значения дипольных моментов аминов. Корреляция между *I* и *n* неудовлетворительна. Однако, величины *m* аминов закономерно убывают

Табл. 2.

Параметры уравнения 1

Параметр амина, X	a	b	Коэффициент корреляции, r	Число аминов, N	Амины
(PA) g	(26,56 ± 1,34)	-(0,02 ± 0,001)	0,977	11	Все
E _p	(4,86 ± 0,26)	(2,26 ± 0,18)	0,975	10	Все
pK _B	(8,67 ± 0,81)	(0,11 ± 0,04)	0,921	8	(RNH ₂)
pK _B	(7,26 ± 0,29)	(0,22 ± 0,08)	0,850	7	(R ₂ NH) (без III)
pK _B	-(3,56 ± 1,19)	(3,43 ± 0,37)	0,988	4	(R ₃ N) (без(CH ₃) ₃ N)
n	(6,69 ± 1,10)	(0,43 ± 0,22)	0,744	6	(RNH ₂)
n	(4,98 ± 0,87)	(0,63 ± 0,17)	0,876	6	(R ₂ NH)
σ	(9,35 ± 0,05)	(4,74 ± 0,501)	0,989	4	(RNH ₂)
q _N	(8,30 ± 0,04)	-(11,90 ± 1,15)	0,986	6	(RNH ₂)
q _N	(2,37 ± 1,2)	-(64,29 ± 33,6)	0,968	3	(R ₃ N)
q _N	(9,87 ± 0,28)	(29,79 ± 4,74)	0,880	13	Все

в ряду



В корреляционном анализе применяются различные константы заместителей и корреляционных соотношений, полученные с использованием различных типов реакционных серий. Например, σ - функция Тафта [9,10] и E_s , который отражает стерические эффекты заместителя. Так, в ряду CH_3 -, C_2H_5 -, n - C_3H_7 -, n - C_4H_9 -, пиперидил и морфолил σ имеет следующие значения -0,07, -0,10, -0,115, -0,13, -0,18 и -0,67. E_s для выше упомянутого ряда будет 0, -0,07, -0,36, -0,48, -0,51 и -0,51.

Для первичных аминов имеется отличная корреляция между I и σ (табл.2)

Как видно из приведенного анализа, в основном получаются хорошие корреляции между I и другими параметрами аминов. Учитывая, что при реакциях аминов с радикалами, пероксидами и H_2O_2 константа скорости коррелируется с I [1-3] и величина последнего зависит от заряда азота, нами квантовохимическими расчетами оценен заряд азота и сделан анализ для нахождения корреляции между I известных аминов и q_N - заряд азота в молекуле амина.

Данные квантовохимических расчетов приведены в таблице 1. Для первичных аминов с повышением q_N , I увеличиваются. Получается хорошая корреляция между I и q_N . Для третичных аминов корреляции хорошие. Следует отметить, что когда первичные, вторичные и третичные амины рассматриваются вместе, то получается удовлетворительная корреляция между I и q_N .

Ввиду того, что реакции Михаэля протекают по нерадикальному механизму, естественно полагать, что чем больше потенциал ионизации, тем активнее амин по отношению ко ненасыщенным соединениям.

Для выражения активности вторичного амина в реакциях с H_2O_2 впервые предложено многопараметровое эмпирическое корреляционное уравнение, включающее потенциал ионизации амина (I), его основность (pK_B), стерический фактор заместителя (E_s)

и дипольный момент (m).

$$\lg k = \lg k_0 + a_1 I + a_2 pK_B + a_3 E_s + a_4 m$$

Решением уравнения для реакции акрилонитрил-вторичный амин получается отличная корреляция:

$$\lg k_{\text{АН}} = -(11,66 \pm 6,5) + (0,87 \pm 0,28) I + (0,31 \pm 0,17) pK_B + (0,016 \pm 0,06) E_s + (0,35 \pm 0,1) m, r = 0,987, n = 5$$

Анализ предложенного уравнения показал, что потенциал ионизации аминов является тем структурным параметром, который определяет реакционную способность аминов в изученных реакциях. Однако этот вывод не дает основания для того, чтобы пренебречь влиянием остальных параметров. Это заключение впервые подкреплено квантовохимическими расчетами;

References:

1. Bejlerjan N.M. O korreljacii mezhdru potencialom ionizacii aminov i skorost'ju ih okislenija perekisjami [On the correlation between the amines ionization potential and the speed of their oxidation by peroxides]., Uch. zap. EGU., 1971, No. 1., pp. 128-144
2. Beyleryan N.M. Dependence of amine reactivity on its ionization potential in reactions with different oxidations including electron-exited ketones., Oxidation comm., - 2001, vol. 24, No. 4., pp. 477-503. <http://dx.doi.org/10.1002/chin.200223283>
3. Beylerian N.M., Simonian G.S. Kinetic Study of reactions $\text{R}_2\text{NH} + \alpha, \beta$ -unsaturated compound. The rate dependence on reagents structure and solvents nature. Quantitative study of some amines reactivity toward peroxides and $\text{ROO}\cdot$, $\text{HO}\cdot$ Free radical., In Trends in Molecular and High Molecular Science. - New York., "Nova Scien. Pub. Inc.", - 2005, Ch. 12, - pp. 199-216.
4. Bronsted J.N., Pederson K.J. The catalytic decomposition of nitramide and its phisico-chemical applications., J. Phys. Chem., - 1924, Bd 108., pp. 185-235.
5. Osipov O.L., Minkin V.M. Spravochnik po dipol'nym momentam molekul [Reference book on the dipolar moments of molecules]. - Moskva.,

Vyshh. shkola, 1965., - 219 p.

6. Swain C.G., Scott C.B. Quantitative Corelation of Relative Rates.Comparison of Hidroxide Ion with Other Nucleofilic Reagents toward Alkyl Halides, Esters, Epoxides and Acyl Halides., J. Am. Chem. Soc., - 1953, vol. 75, No. 1., pp. 141-147. <http://dx.doi.org/10.1021/ja01097a041>
7. Leman T., Beren M. Spektroskopija ionnogo ciklotronnogo rezonansa (per. s angl.) [Spectroscopy of the ionic cyclotron resonance]. - Moskva., 1980. - 67 p.
8. Mann Ch.K. Cyclic Stationary Electrode Voltammetry of some Aliphatic Amines., Anal.Chem., - 1964, vol. 36., pp. 2424-2426. <http://dx.doi.org/10.1021/ac60219a014>
9. Taft R.W. Polar and Staric Substituent Constants for Aliphatic and o-Benzoate Groups from Rates of Esterification and Hydrolysis of Esters., J. Am. Chem. Soc., - 1952, vol. 74, No. 12., pp. 3120-3128. <http://dx.doi.org/10.1021/ja01132a049>
10. Taft R.W., Lewis I.C. The General Applicability of a Fixed Scale of Inductive Effects. II. Inductive Effects of Dipolar Substituents in the Reactivities of m- and p-Substituted Derivatives of Benzene., J. Am. Chem. Soc., - 1958, vol. 80, No. 10, - pp. 2436-2441. <http://dx.doi.org/10.1021/ja01543a023>

Литература:


1. Бейлерян Н.М. О корреляции между потенциалом ионизации аминов и скоростью их окисления перекисями., Уч. зап. ЕГУ, 1971, No. 1, с. 128-144.
2. Beyleryan N.M. Dependence of amine reactivity on its ionization potential in reactions with different oxidations including electron-exited ketones., Oxidation comm., 2001, vol. 24, No. 4, pp. 477-503. <http://dx.doi.org/10.1002/chin.200223283>
3. Beylerian N.M., Simonian G.S. Kinetic Study of reactions $\text{R}_2\text{NH} + \alpha, \beta$ -unsaturated compound. The rate dependence on reagents structure and solvents nature. Quantitative study of some amines reactivity toward peroxides and $\text{ROO}\cdot$, $\text{HO}\cdot$ Free radical., In Trends in Molecular and High Molecular Science. - New York., "Nova Scien. Pub.

Inc.", 2005, Ch. 12, pp. 199-216.


4. Bronsted J.N., Pederson K.J. The catalytic decomposition of nitramide and its physico-chemical applications., J. Phys. Chem., 1924, Bd 108, pp. 185-235.

5. Осипов О.Л., Минкин В.М. Справочник по дипольным моментам молекул. - Москва, Высш. школа, 1965., с. 219.


6. Swain C.G., Scott C.B. Quantitative Correlation of Relative Rates. Comparison of Hydroxide Ion with Other Nucleophilic Reagents toward Alkyl Halides, Esters, Epoxides and Acyl Halides., J. Am. Chem. Soc.,


1953, vol. 75, No. 1, pp. 141-147.  <http://dx.doi.org/10.1021/ja01097a041>

7. Леман Т., Берен М. Спектроскопия ионного циклотронного резонанса (пер. с англ.). - Москва, 1980, с. 67.

8. Mann Ch.K. Cyclic Stationary Electrode Voltammetry of some Aliphatic Amines., Anal.Chem., 1964, vol. 36, pp. 2424-2426.  <http://dx.doi.org/10.1021/ac60219a014>

9. Taft R.W. Polar and Steric Substituent Constants for Aliphatic and o-Benzoyl Groups from Rates of Esterification and Hydrolysis of Esters.,

J. Am. Chem. Soc., 1952, vol. 74, No. 12, pp. 3120-3128.  <http://dx.doi.org/10.1021/ja01132a049>

10. Taft R.W., Lewis I.C. The General Applicability of a Fixed Scale of Inductive Effects. II. Inductive Effects of Dipolar Substituents in the Reactivities of m- and p-Substituted Derivatives of Benzene., J. Am. Chem. Soc., 1958, vol. 80, No. 10, pp. 2436-2441.  <http://dx.doi.org/10.1021/ja01543a023>

Information about author:

1. Geworg Simonian - Candidate of Chemistry, Associate Professor; Yerevan State University; address: Armenia,

MODELING OF TECHNOLOGICAL OBJECTS ON THE BASIS OF EXPERIMENTAL DATA IN CONDITIONS OF UNCERTAINTY

M. Gorbichuk, Doctor of Technical Sciences, Full Professor
T. Gumenyuk, Assistant
D. Povarchuk, Postgraduate Student
Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, Ukraine

A method of building empirical models of the polynomial type for the case when the input factors are fuzzy variables with known Gaussian-type membership functions has been developed. It has been shown, that in such conditions the output model index is also a fuzzy value; the corresponding membership function, being the basis for the formation of the identification task, has been acquired.

Keywords: model, polynomial dependence, membership function, fuzzy numbers, method, model parameters.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship


МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМИ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

Горбичук М.И., д-р техн. наук, проф.
Гуменюк Т.В., ассистент
Поварчук Д.Д., аспирант
Ивано-Франковский национальный технический университет нефти и газа, Украина

Разработан метод построения эмпирических моделей полиномиального вида для случая, когда входные факторы являются нечеткими величинами с известными функциями принадлежности гауссова типа. Показано, что при таких условиях выходная величина модели также нечеткая величина и получена соответствующая функция принадлежности, которая является основой для формирования задачи идентификации.

Ключевые слова: модель, полиномиальная зависимость, функция принадлежности, нечеткие числа, метод, параметры модели.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1184>

Рассматривается объект, который имеет m входов x_i , $i = \overline{1, m}$ и один выход y . Зависимость $y = f(\bar{x})$, где $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$, будем искать в виде уравнения регрессии

$$y = \sum_{j=0}^n c_j \prod_{i=1}^m x_i^{\varphi_{ji}}, \quad (1)$$

где c_j - коэффициенты полинома; φ_{ji} - степени аргументов, удовлетво-

ряющие ограничению $\sum_{i=1}^m \varphi_{ji} \leq r$,

$\forall j$. Число членов n полинома (1) определяют по формуле [1]:

$$n = \frac{(m+r)!}{m!r!}. \quad (2)$$

В том случае, когда переменные x_i , $i = \overline{1, m}$, измеряются без ошибок, а на значение y накладывается аддитивная помеха, которая имеет нормальный закон распределения, и параметры такого закона являются неизменными для всех точек наблюдений. Тогда для определения параметров модели (1) можно использовать метод наименьших квадратов или обобщенный метод наименьших квадратов для случая, когда дисперсии аддитивного препятствия известны, но разные в точках наблюдений.

На практике информация о статистических характеристиках аддитивной помехи доступна только в от-

дельных случаях. Более того, входные величины по тем или иным причинам измеряются неточно и их значения можно указать с некоторой неуверенностью. Задача идентификации значительно усложняется в тех случаях, когда измерительный сигнал проходит через естественный канал с неизвестными статистическими характеристиками. Такая ситуация встречается, например, при бурении скважин, когда осевая нагрузка на долото и частота его вращения измеряются наземными приборами.

В таких случаях входные величины x_i , $i = \overline{1, m}$ естественно интерпретировать как нечеткие величины с функциями принадлежности

$$\mu(x_i) = \exp \left(-\frac{(x_i - x_i^{(0)})^2}{2\alpha_{xi}^2} \right). \quad (3)$$

где $x_i^{(0)}$, α_{xi} , $i = \overline{1, m}$ - соответственно модальное значение и параметр нечеткости функции принадлежности.

Будем искать функцию принадлежности выходной величины.

$$\begin{aligned} \mu(y) &= \mu \left(\sum_{j=0}^n c_j \prod_{i=1}^m x_i^{\varphi_{ji}} \right) = \\ &= \exp \left(-\frac{(y - a_y)^2}{2\alpha_y^2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

Параметры a_y и α_y функции принадлежности (3) определим, используя правила выполнения арифметических операций над нечеткими числами - типа $(L-R)$ в гауссовом базисе [2, 3]. Исходя из структуры модели (1), для определения параметров a_y и α_y функции принадлежности (4), необходимы такие операции над нечеткими числами как сложение, умножение нечетких чисел и умножения нечеткого числа на четкое.

Пусть $A_{LR} = \langle a_1, \alpha_1, \beta_1 \rangle$ и $B_{LR} = \langle a_2, \alpha_2, \beta_2 \rangle$ - нечеткие числа $(L-R)$ - типа, где a_1 , a_2 - модальные значения; α_1 , α_2 , β_1 , β_2 - левые и правые коэффициенты нечеткости. Тогда параметры нечетких чисел $C_{LR} = A_{LR} + B_{LR} = \langle a, \alpha, \beta \rangle$, $C_{LR} = A_{LR} \cdot B_{LR} = \langle a, \alpha, \beta \rangle$ и $C_{LR} = qA_{LR} = \langle a, \alpha, \beta \rangle$ соответственно вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} a &= a_1 + a_2, \quad \alpha = \alpha_1 + \alpha_2, \\ \beta &= \beta_1 + \beta_2; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} a &= a_1 a_2, \quad \alpha = a_1 \alpha_2 + a_2 \alpha_1, \\ \beta &= a_1 \beta_2 + a_2 \beta_1; \end{aligned} \quad (6)$$

$$a = qa_1, \quad \alpha = q\alpha_1, \quad \beta = q\beta_1. \quad (7)$$

Вычислим сумму n нечетких

чисел $S = \sum_{i=1}^n Z_i$, для каждого из

которых функция принадлежно-

сти определяется формулой, кото-
рая аналогична формуле (3). Очеви-
дно, что $z_i^{(LR)} = \langle a_{zi}, \alpha_{zi}, \alpha_{zi} \rangle$. Имеем
 $s_{1..2} = z_1 + z_2$. В соответствии с форму-
лой (5) $s_{1..2}^{(LR)} = \langle a_{1..2}, \alpha_{1..2}, \alpha_{1..2} \rangle$, где
 $a_{1..2} = a_{z1} + a_{z2}$, $\alpha_{1..2} = \alpha_{z1} + \alpha_{z2}$. По-
скольку $s_{1..3}^{(LR)} = z_1 + z_2 + z_3 = s_{1..2} + z_3$
, то $s_{1..3}^{(LR)} = \langle a_{1..3}, \alpha_{1..3}, \alpha_{1..3} \rangle$, где
 $a_{1..3} = a_{1..2} + a_{z3}$, $\alpha_{1..3} = \alpha_{1..2} + \alpha_{z3}$.
С учетом значений $a_{1..2}$ и $\alpha_{1..2}$ бу-
дем иметь $a_{1..3} = a_{z1} + a_{z2} + a_{z3}$,
 $\alpha_{1..3} = \alpha_{z1} + \alpha_{z2} + \alpha_{z3}$. Продолжая
такой итерационный процесс, в общем
случае получим следующий резуль-
тат: $s_{LR} = \langle a_s, \alpha_s, \alpha_s \rangle$, где

$$a_s = \sum_{i=1}^n a_{zi}, \quad \alpha_s = \sum_{i=1}^n \alpha_{zi}. \quad (8)$$

Используя формулу (6), можно по-

казать, что в случае, когда $S = \sum_{i=1}^n c_i z_i$

, будем иметь $s_{LR} = \langle a_s, \alpha_s, \alpha_s \rangle$, где

$$a_s = \sum_{i=1}^n c_i a_{zi}, \quad \alpha_s = \sum_{i=1}^n c_i \alpha_{zi}. \quad (9)$$

Для произведения m не-

четких чисел $V = \prod_{i=1}^m z_i$, где

$z_i^{(LR)} = \langle a_{zi}, \alpha_{zi}, \alpha_{zi} \rangle$, будем иметь
 $V_{1..2} = z_1 z_2$. Найдем параметры нечет-
кой величины $V_{1..2}^{(LR)} = \langle a_{1..2}, \alpha_{1..2}, \alpha_{1..2} \rangle$.
Согласно формуле (7) $a_{1..2} = a_{z1} a_{z2}$
и $\alpha_{1..2} = a_{z1} \alpha_{z2} + a_{z2} \alpha_{z1}$. Теперь мо-
жем записать $V_{1..3} = z_1 z_2 z_3 = V_{1..2} z_3$
и соответственно
 $V_{1..3}^{(LR)} = \langle a_{1..3}, \alpha_{1..3}, \alpha_{1..3} \rangle$. Находим
 $a_{1..3} = a_{1..2} a_{z3}$ и $\alpha_{1..3} = a_{1..2} \alpha_{z3} + a_{z3} \alpha_{1..2}$.
Учитывая значения $a_{1..2}$ и $\alpha_{1..2}$
, получим $a_{1..3} = a_{z1} a_{z2} a_{z3}$ и
 $\alpha_{1..3} = a_{z1} a_{z2} \alpha_{z3} + a_{z3} (a_{z1} \alpha_{z2} + a_{z2} \alpha_{z1}) =$
 $= a_{z1} a_{z2} \alpha_{z3} + a_{z1} a_{z3} \alpha_{z2} + a_{z2} a_{z3} \alpha_{z1}$.
Поскольку $V_{1..4} = V_{1..3} z_4$ и
 $V_{1..4}^{(LR)} = \langle a_{1..4}, \alpha_{1..4}, \alpha_{1..4} \rangle$, то со-
гласно (7) $a_{1..4} = a_{1..3} a_{z4}$ и
 $\alpha_{1..4} = a_{1..3} \alpha_{z4} + a_{z4} \alpha_{1..3}$. Если
учесть ранее найденные значе-
ния $a_{1..2}$ и $\alpha_{1..2}$, то будем иметь
 $a_{1..4} = a_{z1} a_{z2} a_{z3} a_{z4}$ и $\alpha_{1..4} =$
 $= a_{z1} a_{z2} a_{z3} \alpha_{z4} + a_{z4} (a_{z1} a_{z2} \alpha_{z3} +$

$$+ a_{z1} a_{z3} \alpha_{z2} + a_{z2} a_{z3} \alpha_{z1}) =$$

$$a_{z1} a_{z2} a_{z4} \alpha_{z3} + a_{z1} a_{z3} a_{z4} \alpha_{z2} +$$

$$+ a_{z2} a_{z3} a_{z4} \alpha_{z1}.$$

Обобщая полученный ре-
зультат, приходим к выводу, что
 $V_{LR} = \langle a_V, \alpha_V, \alpha_V \rangle$, где

$$a_V = \prod_{i=1}^m a_{zi},$$

$$\alpha_V = \sum_{i=1}^m \alpha_{zi} \prod_{\substack{k=1, \\ k \neq i}}^m a_{zk} \quad (10)$$

Используя формулу (10), найдем
степень нечеткого числа $(L-R)$ -
типа. Если $z_1 = z_2 = \dots = z_m = z$, то
 $V = z^m$ и $V_{LR} = \langle a_V, \alpha_V, \alpha_V \rangle$. Итак,

$$a_V = a_z^m, \quad \alpha_V = m \alpha_z a_z^{m-1}, \quad m \geq 2. \quad (11)$$

Полученные результаты позволя-
ют найти функцию принадлежности
 $\mu(y)$ исходной величины y . Введем

обозначения $z_j = \prod_{i=1}^m x_i^{\varphi_{ji}}$. Тогда

модель (1) примет следующий вид:

$$y = \sum_{j=0}^n c_j z_j \quad \text{и} \quad y_{LR} = \langle a_y, \alpha_y, \alpha_y \rangle.$$

Согласно формул (10) $a_y = \sum_{j=0}^n c_j a_{zj}$

и $\alpha_y = \sum_{j=0}^n c_j \alpha_{zj}$. Найдем значение

a_{zj} и α_{zj} . Для этого введем еще одну

нечеткую переменную $p_i(j) = x_i^{\varphi_{ji}}$ и

$$p_i^{(LR)}(j) = \langle a_{pi}(j), \alpha_{pi}(j), \alpha_{pi}(j) \rangle.$$

Тогда $z_j = \prod_{i=1}^m p_i(j)$. В соответствии

с формулами (10) $a_{zj} = \prod_{i=1}^m a_{pi}(j)$ и

$$\alpha_{zj} = \sum_{i=1}^m \alpha_{pi}(j) \prod_{\substack{k=1, \\ k \neq i}}^m a_{pk}(j). \quad (12)$$

Поскольку $p_i(j) = x_i^{\varphi_{ji}}$ и
 $x_i^{(LR)} = \langle x_i^{(0)}, \alpha_{xi}, \alpha_{xi} \rangle$, $i = 1, m$, то
согласно формул (11)

$$a_{pi}(j) = (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}}, \quad a_{pk}(j) = (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}} \quad \text{и}$$

$$\alpha_{pi}(j) = \varphi_{ji} (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}-1} \alpha_{xi}.$$

Подставляя полученные результаты в форму-
лы (12), получим $a_{zj} = \prod_{i=1}^m (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}}$

$$\text{и} \quad \alpha_{zj} = \sum_{i=1}^m \varphi_{ji} (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}-1} \alpha_{xi} \prod_{\substack{k=1, \\ k \neq i}}^m (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}}.$$

Зная a_{zj} и α_{zj} , находим

$$a_y = \sum_{j=0}^n c_j \prod_{k=1}^m (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}},$$

$$\alpha_y = \sum_{j=0}^n c_j \left(\sum_{i=1}^m \varphi_{ji} (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}-1} \alpha_{xi} \prod_{\substack{k=1, \\ k \neq i}}^m (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}} \right). \quad (13)$$

Для функции принадлежно-
сти (4) определим γ - срез. Тогда

$$\exp \left(- \frac{(y - a_y)^2}{2 \alpha_y^2} \right) = \gamma.$$

С последнего уравнения опреде-
лим

$$y = a_y + \alpha_y \sqrt{\ln \frac{1}{\gamma^2}}. \quad (14)$$

Подставляя значения a_y и α_y с
(13) в форму (14), получаем

$$y = \sum_{j=0}^n c_j \left(\prod_{i=1}^m (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}} + \right. \\ \left. + A_j \left(\sum_{i=1}^m \varphi_{ji} (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}-1} \alpha_{xi} \prod_{\substack{k=1, \\ k \neq i}}^m (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}} \right) \right), \quad (15)$$

$$\text{где } A_j = \sqrt{\ln \frac{1}{\gamma^2}}.$$

Полученный результат свидетель-
ствует о том, что учет нечеткости ис-
ходных данных приводит к появлению
определенного «штрафа», величина
которого определяется параметрами
функций принадлежности (3).

Теперь можно сформулировать
задачу нечеткой идентификации сле-
дующим образом: определить пара-
метры c_j , $j = \overline{0, n-1}$ модели (15)
таким образом, чтобы минимизиро-
вать сумму квадратов отклонений
расчетных значений, определяемых
соотношением (15), от значений, на-
блюдаемых на выходе объекта

$$J(\bar{c}) = \sum_{i=1}^N (Y_i - y_i)^2, \quad (16)$$

где y_i - вычисленные значения
выходной величины для каждой точки
наблюдений.

Допускаем, что наблюдению до-
ступны входящие величины $x_i^{(0)}$,
которые обозначим как x_i , $i = \overline{1, m}$.
Сформируем матрицу F из функций

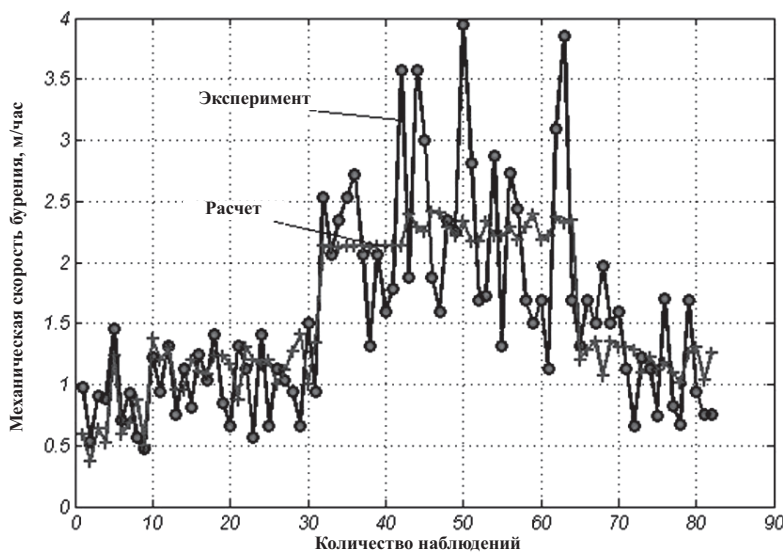


Рис. 1. Зависимость $v_0(\bar{x})$ от режимных параметров x_1 и x_2

при коэффициентах c_j уравнения регрессии (15) размером $n \times N$, где N - число наблюдений за входными и выходной величинами.

Тогда $\bar{y} = F\bar{c}$ и функционал (15) примет следующий вид:

$$J(\bar{c}) = (\bar{Y} - \bar{y})^T (\bar{Y} - \bar{y}), \quad (16)$$

где $\bar{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N)^T$ - вектор значений исходной величины в каждой точке наблюдений $t = \overline{1, N}$; $\bar{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ - вектор вычисленных значений выходной величины по формуле (15) в каждой точке наблюдений.

Минимизация функционала (16) за вектор-переменной \bar{c} приводит к такому результату [4]: $\bar{c} = M^{-1}F^T\bar{Y}$, где $M = F^TF$ - матрица Фишера.

Допустим, что зависимость между входом и выходом некоторого объекта описывается соотношением (1). При этом $m = 2$ и $r = 2$. Количество членов такой регрессионной зависимости вычислим по формуле (2) - $n = 6$.

Введем такое обозначение:

$$f(\bar{x}, \varphi_{ji}) = \sum_{i=1}^m \varphi_{ji} (x_i^{(0)})^{\varphi_{ji}-1} \alpha_{xi} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^m (x_k^{(0)})^{\varphi_{jk}}.$$

Образует матрицу степеней регрессионной модели (1)

$$\Phi^T = \begin{bmatrix} \varphi_{01} & \varphi_{11} & \varphi_{21} & \varphi_{31} & \varphi_{41} & \varphi_{51} \\ \varphi_{02} & \varphi_{12} & \varphi_{22} & \varphi_{32} & \varphi_{42} & \varphi_{52} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Вычислим $f(\bar{x}, \varphi_{0i}) = \varphi_{01} x_1^{\varphi_{01}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{02}} + \varphi_{02} x_2^{\varphi_{02}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{01}}$. Учитывая значение φ_{01} и φ_{02} , получим $f(\bar{x}, \varphi_{0i}) = 0$.

Аналогично находим, что

$$\begin{aligned} f(\bar{x}, \varphi_{1i}) &= \varphi_{11} x_1^{\varphi_{11}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{12}} + \varphi_{12} x_2^{\varphi_{12}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{11}} = \alpha_{x_1}, \\ f(\bar{x}, \varphi_{2i}) &= \varphi_{21} x_1^{\varphi_{21}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{22}} + \varphi_{22} x_2^{\varphi_{22}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{21}} = \alpha_{x_2}, \\ f(\bar{x}, \varphi_{3i}) &= \varphi_{31} x_1^{\varphi_{31}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{32}} + \varphi_{32} x_2^{\varphi_{32}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{31}} = \alpha_{x_1} x_2 + \alpha_{x_2} x_1, \\ f(\bar{x}, \varphi_{4i}) &= \varphi_{41} x_1^{\varphi_{41}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{42}} + \varphi_{42} x_2^{\varphi_{42}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{41}} = \alpha_{x_2}, \\ f(\bar{x}, \varphi_{5i}) &= \varphi_{51} x_1^{\varphi_{51}-1} \alpha_{x_1} x_2^{\varphi_{52}} + \varphi_{52} x_2^{\varphi_{52}-1} \alpha_{x_2} x_1^{\varphi_{51}} = 2\alpha_{x_2} x_2. \end{aligned}$$

Итак, с учетом нечеткости

входных переменных, выход объекта ($m=2$, $r=2$) описывается такой эмпирической зависимостью:

$$y = c_0 + c_1(x_1 + A_{\gamma} \alpha_{x_1}) + c_2(x_2 + A_{\gamma} \alpha_{x_2}) + c_3(x_1 x_2 + A_{\gamma}(x_1 \alpha_{x_2} + x_2 \alpha_{x_1})) + c_4(x_1^2 + 2A_{\gamma} \alpha_{x_1} x_1) + c_5(x_2^2 + 2A_{\gamma} \alpha_{x_2} x_2).$$

В том случае, когда $\gamma = 1$ тогда и мы приходим к четкой задаче идентификации, в которой модальные значения входной величины отождествлены с их значениями, подаются непосредственному наблюдению.

Эффективность и работоспособность разработанного метода моделирования проверялась на примере процесса углубления скважин. Про-

мышленные данные были получены при бурении одной из скважин Над-вириянского УБР.

Исследовалась функциональная зависимость механической скорости бурения от технологических параметров такие как осевая нагрузка на долото P и частота его вращения N_{δ} . Поскольку режимные параметры P и N_{δ} измеряются наземными приборами, то значение P и N_{δ} рассматривались как нечеткие числа.

Для приведения переменных модели в соразмерных значений режимные параметры процесса бурения осевая нагрузка на долото F и частота вращения ротора N_{δ} были приведе-

ны к безразмерному виду $x_i = \frac{X_i}{X_{max}}$,

$i = \overline{1, N}$, где $x \in \{\tilde{P}, \tilde{N}_{\delta}\}$, $X \in \{P, N_{\delta}\}$; N - количество точек наблюдений; \tilde{P} , \tilde{N}_{δ} - значение P , N_{δ} в безразмерных единицах.

Были выбраны следующие значения: $r = 3$ и $m = 2$. Синтез модели (15) осуществлялся с помощью разработанного генетического алгоритма [5], который позволяет вычислить не только параметры модели, но и выбрать оптимальную структуру модели на основе критерия регулярности. В среде MatLab, соответствующее программное обеспечение реализации задачи моделирования с разработанным методом. В результате работы программы получили следующие значения параметров эмпирической модели: $c_1 = 1,5478$; $c_4 = 0,1793$; $c_9 = 0,3498$. На рис. 1 показана зависимость функции $v_0(\bar{x})$ от режимных параметров $x_1 = \tilde{F}$ и $x_2 = \tilde{N}_{\delta}$.

Разработанный метод построения эмпирической модели полиномиального вида, который допускает, что входные факторы нечеткие величины с известной функцией принадлежности гауссова типа. Показано, что полученная эмпирическая модель также является полиномом, где входные факторы имеют дополнительную составляющую, которая является своеобразной «платой» за нечеткость входной информации. Для синтеза нечеткой модели использован метод, основанный на идеях генетических алгоритмов.

References:

1. Gorbijchuk M.I. Induktivnyj metod postroenija matematicheskikh modelej gazoperekachivajushhih agregatov prirodnogo gaza [Inductive method of building mathematical models of units distributing the natural gas]., M.I. Gorbijchuk, M.I. Kogutjak, Ja.I. Zajachuk., Neftjanaja i gazovaja promyshlennost' [Oil and gas industry]. - 2008., No. 5., pp. 32 - 35.

2. Djubua D. Teorija vozmozhnostej. Prilozhenie k predstavleniju znanij v informatike [Theory of opportunities. The annex to presentation of knowledge in informatics]; per. s fr., D. Djubua, A. Prad. – Moskva., Radio i svjaz', 1990. – 286 p.

3. Raskin L.G. Nechetkaja matematika. Osnovy teorii . Prilozhenija [Indistinct mathematics. Theory bases. Appendices]., A.G. Raskin, O.V. Seraja. – Har'kov., Parus, 2008. – 352 p.

4. Ermakov S.M. Matematicheskaja teorija optimal'nogo jeksperimenta [Mathematical theory of optimum experiment]., S.M. Ermakov, A.A. Zhigljavskij - Moskva., Nauka [Science], 1987. - 280 p.

5. Gorbijchuk M.I. Metod sinteza jempiricheskikh modelej na osnove geneticheskikh algoritmov [Method of synthesis of empirical models on the basis of genetic algorithms]., M.I. Gorbijchuk, M.I. Kogutjak, A.B. Vasilenko, I.V. Shhupak., Razvedka i razrabotka neftjanyh i gazovyh mestorozhdenij [Investigation and exploitation of oil and gas fields]. - 2009., No. 4 (33)., pp. 72-79.

Литература:

1. Горбийчук М.И. Индуктивный метод построения математических моделей газоперекачивающих агрегатов природного газа., М.И. Горбийчук, М.И. Когутяк, Я.И. Заячук., Нефтяная и газовая промышленность. - 2008., № 5., С. 32 - 35.

2. Дюбуа Д. Теория возможностей. Приложение к представлению знаний в информатике; пер. с фр., Д. Дюбуа, А. Прад. – Москва., Радио и связь, 1990. – 286 с.

3. Раскин Л.Г. Нечеткая математика. Основы теории. Приложения., А.Г. Раскин, О.В. Серая. – Харьков., Парус, 2008. – 352 с.

4. Ермаков С.М. Математическая теория оптимального эксперимента., С.М. Ермаков, А.А. Жиглявский - Москва., Наука, 1987. - 280 с.

5. Горбийчук М.И. Метод синтеза эмпирических моделей на основе генетических алгоритмов., М.И. Горбийчук, М.И. Когутяк, А.Б. Василенко, И.В. Щупак., Разведка и разработка нефтяных и газовых месторождений. - 2009., № 4 (33)., С. 72-79.

Information about authors:

1. Mikhail Gorbijchuk - Doctor of Technical Sciences, Full Professor, Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas; address: Ukraine, Ivano-Frankivsk city; e-mail: gorb@nung.edu.ua

2. Taras Gumenyuk – Assistant, Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas; address: Ukraine, Ivano-Frankivsk city; e-mail: taraskm@gmail.com

3. Dmytro Povarchuk - Postgraduate Student, Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas; address: Ukraine, Ivano-Frankivsk city; e-mail: ksm@nung.edu.ua


ANALYTICAL CALCULATIONS OF ENERGY CONSUMPTION WHEN MIXING SOLUTION WITH THE HELP OF FUNCTIONAL CHARACTERISTICS

B.O. Korobko, Ph.D. in Technical Sciences, Associate Professor
Poltava National Technical Yuri Kondratyuk University, Ukraine

The influence of rheological characteristics of the mortar mix and the mixer's quality factor on its energy intensity have been studied. We have also determined the recommended operating time for the mixer.

Keywords: mortar mix, mixer, energy intensity.

Conference participant

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1185>

Determination of capacity of electric actuator in a mortar mill of coercive action is rather complicated. Building mortars that are coarse suspensions fall into visco-plastic bodies, which properties and flow conditions differ significantly from viscous liquids. The changeability of physical and mechanical properties of building mortars depending on time and speed assumes great importance. This fact greatly complicates the process of mortar mix flow during the mixing. Therewith there appears a significant amount of resistances, the most prominent among which are frictional strength (internal and external), resistances, caused by the operation of mass motion, and resistances arising from inertial efforts, from wave generation and etc. Many of these resistances do not remain constant during the mixing cycle. Besides, we have a wide range of building solutions depending on mortar formula and on component performances. All of this complicates the matter of determining the resistance components arising in the process of mixing.

Currently there is mostly used the equipment, in which the mixing process takes place due to mechanical impact on the environment.

The first scientific works, dedicated to the study of mixing process and calculation methods of mixing equipment, appeared at the beginning of the last century. There were not many of these works and the number of works that considered mixing suspensions and visco-plastic medium was even less. All this complicated the studying of energetic characteristics in mixing processes, the development of common methods for calculating mixers and the determination of effectiveness and fundamental optimal parameters.

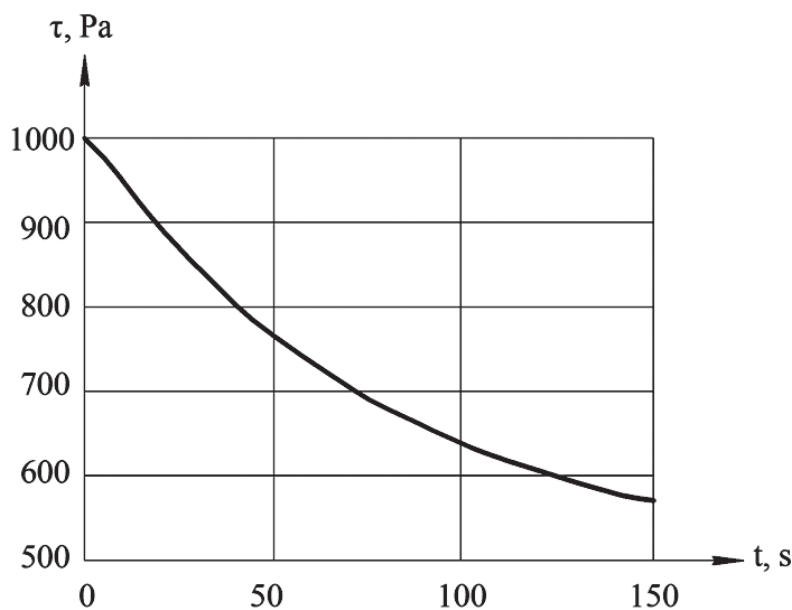


Fig. 1. The dependence of the critical shift voltage on time t

When studying mixing processes the authors of the above-mentioned works considered liquid motion and blending of liquids processes, efficiency determination of blending, heat transfer and catalyzation of chemical behavior. Only a few papers dealt a little with the studying of suspension flow and mixing of suspensions and other visco-plastic bodies [1, 2, 3, 4].

In the 1930-40s there were published the works, dedicated to the issues of power expenditure during mixing [5, 6].

In the research paper [7] there was applied the Newton's law of internal fluid friction to determine the resistances arising during mixing.

In the research paper [8] there was offered the method of calculating screw mixers.

Based on the analysis of the problem, it can be said that the issue of visco-plastic fluid motion has not been studied enough

yet, it is especially subject to coarse suspensions, which include building mortars. There are also no generally accepted calculation methods for mortar mixers. Generally the calculation of equipment, working with such mixtures, is performed by empirical dependences and formulas developed for the cases of viscous fluid motion.

The dependence of the critical shift voltage on time is expressed by the equation

$$\tau(t) = \tau_n + (\tau_0 - \tau_n)e^{-Kt}, \quad (1)$$

where τ – is the critical shift voltage, which goes from its initial value τ_0 (dry mix) to the nominal value, corresponding to ready mix;

K – is the coefficient that characterizes the mixer's quality: the location and geometry of the blades and belts;

t – is time.

Let's see how the value τ (the critical shift voltage) varies according to time t .

Analyzing Fig. 1 we can see that the solution is being mixed to the acceptable level ($\tau = 600 \text{ Pa}$) over the time of 120 seconds.

Power consumed by the mixer is described with the mathematical relation

$$P = \int_S \tau \cdot (\vec{n} \cdot \vec{v}) dS =$$

$$= \tau \cdot \omega \cdot tg \sigma_1 \left[\frac{(R_1 + R_2)}{2} \right] \cdot \pi \cdot (R_2^2 - R_1^2) +$$

$$+ \tau \cdot \omega \cdot m \cdot \frac{tg \sigma_2}{\cos \sigma_2} d \cdot a \cdot b \quad (2)$$

where \vec{n} – is the normal to the elementary area, the unit vector;

\vec{v} – is the speed of elementary area's movement in solution;

S – is the area of belts and blades;

ω – is the rotational speed;

σ_1 – is the belt angle;

σ_2 – is the blade angle;

R_1, R_2 – are the least and the biggest radii of the belt;

m – is the number of blades;

d – is the shoulder of the blade attachment;

a – is the blade width;

b – is the blade length.

In order to search out the total work it's necessary to find t_{stop}

$$\tau_n + (\tau_0 - \tau_n) e^{-K t_{stop}} = 1,1 \tau_n;$$

$$(\tau_0 - \tau_n) e^{-K t_{stop}} = 0,1 \tau_n;$$

$$e^{-K t_{stop}} = \frac{0,1 \tau_n}{\tau_n - \tau_0};$$

$$-K t_{stop} = \ln \frac{0,1 \tau_n}{\tau_n - \tau_0};$$

$$t_{stop} = \frac{1}{K} \ln \frac{\tau_0 - \tau_n}{0,1 \tau_n}. \quad (3)$$

The relation for the total energy is the following (4).

The energy per unit of volume that is expended while stirring the solution, is calculated from the ratio

$$E_{mix.spec.} = \frac{E}{\rho \cdot V \cdot K_{b.f.}}, \quad (5)$$

where ρ – is the density of the mixture;

V – is the mixer's volume;

$K_{b.f.}$ – is the blending hopper's

$$E_{mix.} = \int_0^{t_{stop}} (\tau_n + (\tau_0 - \tau_n) e^{-K t}) dt \cdot \omega \left(tg \sigma_1 \left(\frac{R_1 + R_2}{2} \right) \pi (R_2^2 - R_1^2) + m tg \sigma_2 d a b \right) =$$

$$= \omega \left(tg \sigma_1 \left(\frac{R_1 + R_2}{2} \right) \pi (R_2^2 - R_1^2) + m tg \sigma_2 d a b \right) \left[\tau_n \cdot t_{stop} + \frac{\tau_0 - \tau_n}{K} (1 - e^{-K t_{stop}}) \right] \quad (4)$$

coefficient of charge.

Let's calculate the power consumption depending on the coefficient K for the

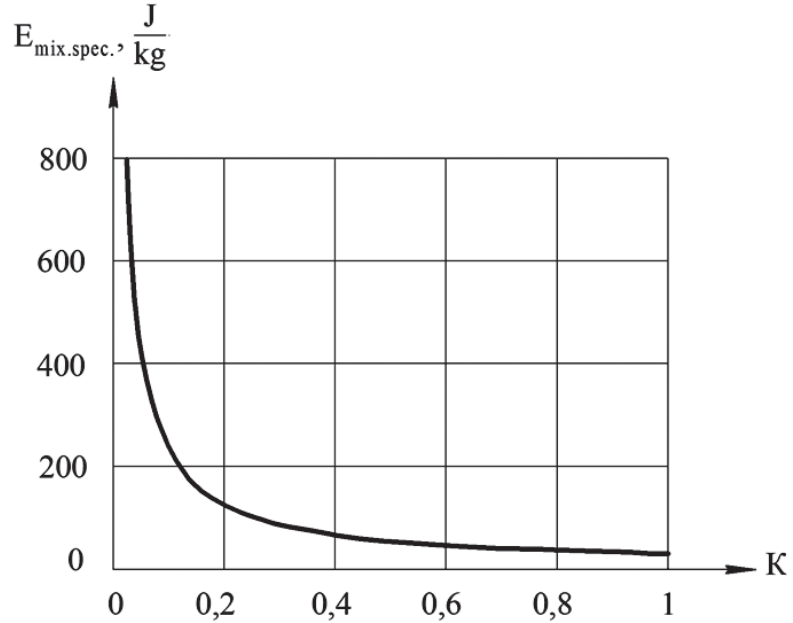


Fig. 2. Dependence of the energy of mixing per unit of volume $E_{mix.spec.}$ on the coefficient K

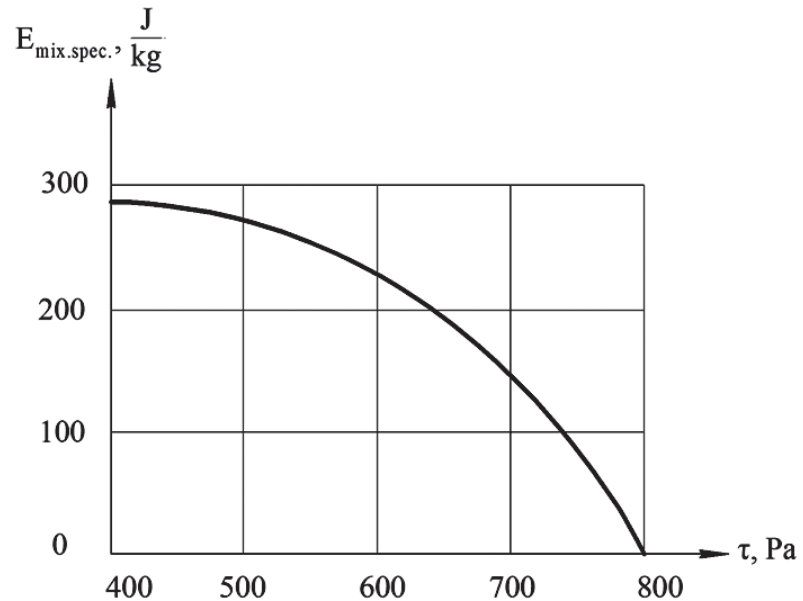


Fig. 3. The dependence of the specific energy of mixing $E_{mix.spec.}$ on the yield point of the ready mix τ_n

following parameters:

$\tau_n = 600 \text{ Pa}$; $\tau_0 = 1000 \text{ Pa}$; $\omega = 2,2 \text{ rad/s}$; $\sigma_1 = 30^\circ$; $l = 1,5 \text{ m}$; R_2^2

$\rho = 2000 \text{ kg/m}^3$; $V = 3,2 \text{ m}^3$; $K_{b.f.} = 0,8$.

From the graph in Fig. 2 we can see that the sustainable range of coef-

ficient's values K ranges within 0.4 – 0.8. Values less than 0.2 lead to a sharp increase in the specific energy consumed for mixing.

Thus, knowing the initial data and the number of K of the mixer, that is conditional upon its geometrical dimensions and knowing also the solution weight, which is prepared by the formula (5) one can determine and compare the energy intensity (J/kg) of various designs of faucets during the preparation of solutions with differential mobility yet drawing-board stage and in the design selection phase.

If we need to determine the dependence of specific energy of mixing on rheological characteristics of the mixture, namely on the τ_n – is the critical shift voltage of the ready mix, then the graph will take the following form.

The proposed method of calculating power consumption allows to the into consideration the basic geometric and

kinematic characteristics of blade and screw mixers, to evaluate the specific energy that is consumed for mixing not only depending on the value of the yield point of the ready mix τ_n , but also on the coefficient K , which characterizes the quality of the mixer.

References:

1. Ivyanskiy G.B. The piping of mason's mortar with the help of a mortar pump., G.B. Ivyanskiy. – Moscow., Stroyizdat publishers., 1995. – 185 p.
2. Ivyanskiy G.B. The mechanization of plastering: the mortar mixer's knot., G.B. Ivyanskiy., The report of ARI on the theme No. 14. – 1949.
3. Kerov I.P. About the resistance and capacity in the work of blade mixers., I.P. Kerov., The construction mechanization. – 1953., No. 12., pp. 6-9.
4. Sevrov K.P. Asphalt plants., K.P. Sevrov, L.P. Kamchatnov. – Moscow., Mashinostroenie publishers, 1971. – 128 p.
5. Hixon A.W. Wall friction in liquid agitation systems. Ind. Eng. Chem, No. 9, 1947.
6. Ruston J.H. Mixing of liquid in chemical processing. Ind. Eng. Chem. – No. 12, 1962.
7. Gzovskiy S.Y. The research of arm mixers' work., S.Y. Gzovskiy. – Moscow., MICI, 1971.
8. Klyuev G.M. The calculation of spiral agitations., G.M. Kyuev. – Moscow., Oborongiz publishers, 1940. – 158 p.

Information about author:

1. Bohdan Korobko - Ph.d. in Technical Sciences, Associate Professor, Poltava National Technical University named after Y. Kondratyuk; address: Ukraine, Poltava city; e-mail: korobko.ukraine@yahoo.com

TAKING THE RESONANCE INTO ACCOUNT WHEN DESIGNING BRIDGE CROSSINGS

H. Tagaev¹, Doctor of International Academy "Antique World", Director of Scientific Center of Inventions of Academy, Full professor
N. Gapporov², Candidate of Mathematics and Physics, Associate Professor
B. Gapporov³, Senior Lecturer
Jizzakh State Pedagogical Institute, Uzbekistan^{1,2}
Jizzakh Polytechnical Institute, Uzbekistan³

In the article its authors have considered the influence of resonance at destruction of bridge crossings on the example of Tacoma Bridge, USA. The essence and the reasons of resonance, as well as scientific and theoretical bases of their elimination are revealed.

Keywords: resonance, bridge, design, natural phenomena, wind speed, bridge paths, fluctuations.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship


УЧЕТ РЕЗОНАНСА ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ МОСТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Тагаев Х.¹, д-р международной академии "Antique World", директор научного центра изобретений академии, проф.
Гаппоров Н.Г.², канд. физ.-мат. наук, доцент
Гаппоров Б.Н.³, ст. преподаватель
Джизакский государственный педагогический институт, Узбекистан^{1,2}
Джизакский Политехнический институт, Узбекистан³

В статье рассматривается влияние резонанса при разрушении мостовых переходов на примере Такома моста США. Раскрывается сущность и причины резонанса и научно-теоретические основы их устранения.

Ключевые слова: резонанс, мост, проектирование, природных явлений, скорость ветра, дорожки моста, колебаний.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1186>

Для выяснения разрушительного влияния резонанса на мостовые переходы рассмотрим случившиеся природные явления на Такома мосте в Америке. Седьмого ноября 1940 водители движущиеся через подвесной мост Такома были свидетелями (на первый взгляд) противоестественного явления (рис.1): несмотря на небольшую скорость ветра (~ 17 м/с) дорожки моста изгибались с частотой колебаний 36/мин., при этом амплитуда колебаний достигала до 1,5 метров, движение по мосту остановилось, многие автомобили остались на середине моста. Водители не смогли перегнать свои автомобили на безопасное расстояние. Частота колебаний постепенно возрастала. На центральной опоре появилась трещина, после этого колебания моста изменили свой характер, резко увеличилась их амплитуда и через некоторое время весь мост разрушился.

Чтобы объяснить это явление обращаем внимание на основные законы механических колебаний, а именно на сущность свободных и вынужденных колебаний [1]

Механические колебания, которые происходят под действием сил, возникающих в самой колебательной системе, называются свободными (это соответствует естественным колебаниям моста, возникающим от собственного веса подвесного моста и прохождения потока автотранспорта).

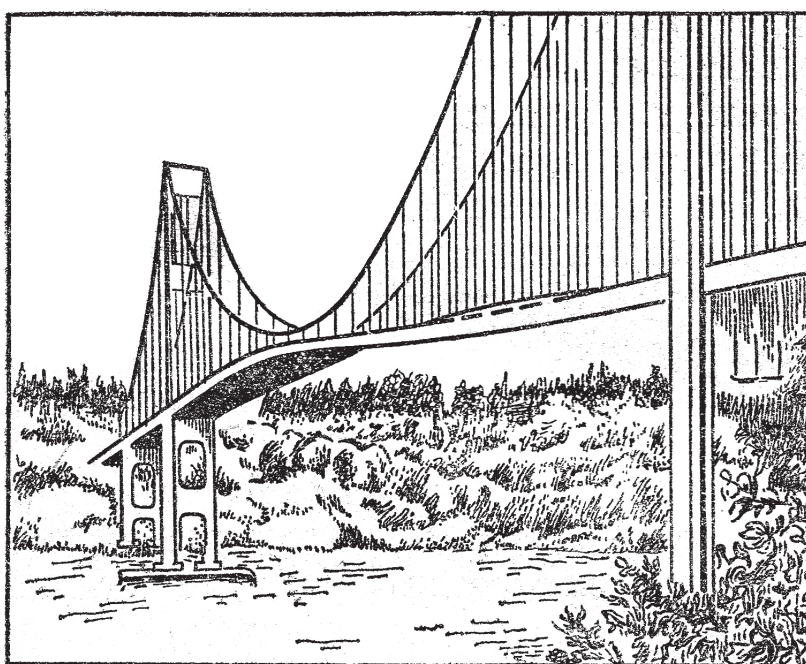


Рис. 1.

Колебания, которые совершает тело, под действием внешней силы называются вынужденным (это соответствует к внешнему воздействию ветра на мост).

Чтобы объяснить причины разрушительного колебания моста вспомним число Рейнольдса для течения жидкости. Число Рейнольдса 2300 - соответствует на ламинарное течение жидкости, от 2300 до 6000 - соответствует неустойчивому режиму тече-

ния, более 6000 относится к турбулентному течению жидкости. При ламинарном течении сила сопротивления F пропорционально скорости потока \mathcal{V} , а при турбулентном течении F пропорционально к квадрату скорости, то есть на \mathcal{V}^2 .

Ламинарный поток (безвихревой) для данного случая не представляет интереса. Нас интересует только турбулентное движение жидкости (ветра).

Явление правильного расположе-

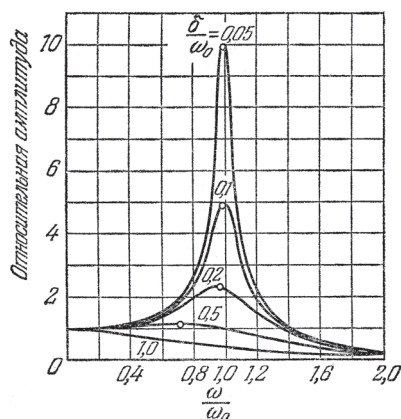


Рис.2.

ния вихрей позади обтекаемого тела впервые было изучено экспериментально немецким физиком Бенаром в начале XX века. Но только благодаря последовавшим вскоре работам Кармана такое течение, казавшееся сначала весьма своеобразным, получило объяснение. По имени этого ученого система периодических вихрей называется дорожкой Кармана. Именно вихревая дорожка Кармана имеет большое практическое значение. Например, провода линий электропередачи колеблются под действием ветра, дующего с постоянной скоростью, из-за отрыва вихрей, эти цепочки вихрей, периодически срывающиеся с поверхности струны, и возбуждают ее звучание, подобному прикосновению к ним пальца.

Из курса физики известно, что амплитуда вынужденных колебаний резко возрастает, если период синусоидальной внешней силы приближается к периоду свободных колебаний тела, это явление называют резонансом.

На рис. 2 приведен резонансные кривые при различных затуханиях

По вертикали отложены относительная амплитуда $\frac{AK}{F_0}$, где A – амплитуда смещения, K – коэффициент квазиупругой силы, F_0 – постоянная сила, равная амплитуде действующей силы.

По горизонтали отложены относительные изменения частоты $\frac{\omega}{\omega_0}$, где ω – круговая частота, который связаны

с частотой колебаний ν следующим отношением: $\omega = 2\pi\nu$; $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ –

частота свободных колебаний при отсутствии трения. Кривые относятся к различным значениям $\frac{\delta}{\omega_0}$, где δ

– коэффициент затухания. Кружочки указывают положение максимального значения амплитуды смещения.

Из рисунка видно, что при $\frac{\delta}{\omega_0} \ll 1$

резонанс увеличивается. В том чис-

ле, при $\frac{\omega}{\omega_0} = 1$, то есть когда частота

та внешней силы. Равняется к частоте свободных колебаний (ветра) системе (моста), то амплитуда смещения бу-

дет равно $\frac{\delta}{\omega_0} = 0,5$ и соответственно

резонанс имеет своего максимального значения.

При $\frac{\delta}{\omega_0} \ll 1$ резонанс не проявляется.

Из вышеуказанного можно сделать вывод, что причиной разрушения Такомского подвесного моста является возникновение резонанса от вихря обдуваемого ветром скоростью ~ 17 м/с. Вихри отрывались от несущей конструкции проезжей части моста. При этом частота ω колебаний внешней силы (сила ветра) приблизилась к частоте колебаний системы ω_0 (свободное колебание моста), это привело к резкому увеличению амплитуды колебаний системы (до 1,5 метра), то есть, к проявлению разрушительного резонанса.

Для устранения вызывающего резонанса моста от вынужденного колебания обсудим некоторые поверхности мостовой дорожки обращенной к потоку ветра и типы течения ветра вокруг их поверхности.

Сила сопротивления, возникающая вследствие разности давлений на передней и задней части (кромках) мостовой дорожки, зависит от плотности воздуха, скорости потока ветра и площади максимального поперечного

сечения, перпендикулярного потоку

$$\rho_x = c \cdot \rho \cdot s \cdot \frac{g^2}{2}$$

Где c – безразмерное число (определяется экспериментально и зависит от скорости) его значение приведены в таблицах.

ρ – плотность воздуха, м/м^3

s – площадь наибольшего сечения моста, перпендикулярной направлению потока, м^2

g – скорость потока ветра, м/с

Под действием силы сопротивления от внешней силы ветрового потока на поверхностях мостовой дорожки возникают поперечные (колебательные) силы, они являются результатом того перераспределения давлений по поверхности (плоскости) мостовой дорожки, которое вызвано действием присоединенного к потенциальному потоку вихря, то есть при этом на передней поверхности моста сохраняются положительные разности давлений. За счет этой разницы давлений возникают вынужденные колебания моста.

Это можно определить по теореме Жуковского $P_y = \rho \cdot g \cdot \Gamma$

где Γ – циркуляция скорости потока ветра ν .

Циркуляцией Γ скорости потока g по контуру профиля s , называется контурным интегралом от скалярного произведения ν на элементарной dr дуге контура C .

$$\Gamma = \oint g \cdot dr$$

Для профиля произвольной формы, вокруг которого установилось тем или иным путем циркуляция равно произведению периметра контура на средние из всех проекций скорости на сам контур.

По Жуковскому вектор поперечной силы P_y направлен по вектору скорости набегающего потока g повернутому на 90° в сторону, противоположную направлению циркуляции.


Из вышесказанного видно, что амплитуда вынужденных колебаний приводящей к резонансу напрямую зависит от отрывающихся вихрей с поверхности (проезжей части) мостовой дорожки. В конечном счете это зависит от формы поверхности моста обдуваемого ветром.

Для Такомского моста, имеющего форму лобовой поверхности (площади) в виде четырехугольной пластины, безразмерный коэффициент был равен $C_{пл}=1,1$, то есть имел максимальное значение, который привело к максимальному завихрению, соответственно амплитуда вынужденных колебаний тоже достигала максимального значения и равнялась с свободным колебанием, в результате чего получился резонанс и разрушился мост.


Так, например, для формы полусферы обращенной потоку, этот коэффициент равен $C_{пс} = 0,35$ и в этой конструкции вихрь образуется слабо, тем самым амплитуда вынужденных колебаний будет меньше чем свободные колебания, соответственно, и резонанс будет слаб или совсем не проявится.

Таким образом, для предотвращения резонанса мостовых переходов при проектировании надо учитывать форму лобовой поверхности (эллипс, овал, в виде клина и т. п.) в зависимости от значения C и технической эстетики.

References:

1. Aslamazov L.G., A.A. Varlamov, Udivitel'naja fizika [The wonders of Physics]. – Moskva., «Nauka», 1988., - pp. 99-102.  <http://dx.doi.org/10.1142/4458>
2. Koshkin N.I., Shirkevich M.G. Spravochnik po jelementarnoj fizike [Reference book on elementary Physics]. - Moskva., «Nauka», 1982, - pp. 81-82.
3. Emcov B.T. Tehniceskaja gidromehanika [Technical hydromechanics]. – Moskva., «Mashinostroenie», 1978.
4. Smirnov G. Rozhdennye vihrem [Born by the whirlwind]. – Moskva., «Znanie», 1982.

Литература:

1. Асламазов Л.Г., А.А. Варламов, Удивительная физика. – Москва., «Наука», 1988., с. 99-102.  <http://dx.doi.org/10.1142/4458>
2. Кошкин Н.И., Ширкевич

М.Г. Справочник по элементарной физике. - Москва., «Наука», 1982, стр. 81-82.

3. Емцов Б.Т. Техническая гидромеханика. – Москва., «Машиностроение», 1978.

4. Смирнов Г. Рожденные вихрем. – Москва., «Знание», 1982.

Information about authors:

1. Hojamberdi Tagaev - Doctor of International Academy "Antique World", Director of Scientific Center of Inventions of Academy, Full professor, Jizzakh State Pedagogical Institute; address: Uzbekistan, Jizzakh city; e-mail: bahrom.ms_@inbox.ru

2. Nematulla Gapparov - Candidate of Mathematics and Physics, Associate Professor, Jizzakh State Pedagogical Institute; address: Uzbekistan, Jizzakh city; e-mail: bahrom.ms_@inbox.ru

3. Begzod Gapparov - Senior Lecturer, Jizzakh Polytechnical Institute; address: Uzbekistan, Jizzakh city; e-mail: bahrom.ms_@inbox.ru

TAGAYEV'S THEORY OF THE SPECIFIED CALCULATION OF THE COMPOUND PENDULUM ARM

H. Tagaev, Doctor of International Academy "Antique World",
Director of Scientific Center of Inventions of Academy, Full
professor, Lecturer
Jizzakh State Pedagogical Institute, Uzbekistan

Using the differential equation of rotation of the solid body around an immovable axle and the Steiner's theorem, the author has determined the state of the centre of gravity (the length of L is given) of a physical pile driver. It will clarify the matter of determination of impact strength of materials. It will also allow to describe the process of interaction between the blade of the pendulum pile driver and the tested sample, and also to determine the main constructive and power parameters.

Keywords: theory, definitions, arm, pendulum, Steiner, regulations, reduced length, strength, impact, sample, testing, performance parameters, pile driver.

Conference participant, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


ТЕОРИЯ ТАГАЕВА ПО УТОЧНЕННОМУ РАСЧЕТУ ПЛЕЧО ФИЗИЧЕСКОГО МАЯТНИКА

Тагаев Х., д-р международной академии "Antique World",
директор научного центра изобретений академии, проф.,
преподаватель
Джизакский государственный педагогический институт,
Узбекистан

Применяя дифференциальное уравнение вращения, твердого тела вокруг неподвижной оси и теорему Штейнера, определено плечо (приведенная длина $l_{пр}$) физического маятника, что внесет определенную ясность в вопросы теории определения ударной вязкости материалов и позволит описать процесс взаимодействия лезвия маятникового копра с испытываемым образцом, определить основные конструктивные и силовые параметры.

Ключевые слова: теория, определения, плечо, маятник, Штейнер, положения, приведенная длина, вязкость, удар, образец, испытания, силовые параметры, копер.

Участник конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i7.1187>

За последние 40 лет появилось много журнальных статей и книг, посвященных ознакомлению с критериями оценки сопротивления конструкционных материалов, стеблей, растений и минеральных удобрений, к динамическим нагрузкам, которые основываются на определении энергии, затрачиваемой на срез, через плечо физического маятника.

Однако, среди этих статей и книг, при расчете плеча физического маятника, имеются разные формулировки, так некоторые из них плечо маятника предлагают определить, расстоянием от режущей кромки до оси подвески, а другие расстоянием от центра тяжести маятника до оси вращения.

Например, автор работ [1] при вычислении суммарной работы деформации разрушения испытываемого образца определяет по формуле $W = Fl (\cos \beta - \cos \alpha)$ кГс·м и предлагает определить плечо физического маятника обозначая l - через расстояние от режущей кромки лезвия ножа до оси подвески (рис.1), где α - угол первоначального подъема маятника; β - угол подъема маятника после совершения работы излома образца.

Автор работ [2, с. 271] В.Т. Седуков выражает его по следующей формуле:

$$A = G \cdot l (\cos \alpha - \cos \beta),$$

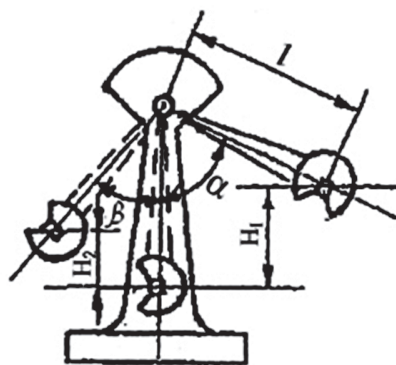


Рис.1.

где G - сила тяжести маятника; l - расстояние от режущей кромки лезвия ножа до оси подвески, см;

α - угол холостого взлета маятника;

β - угол рабочего взлета маятника;

Из формулы видно, что автор путает обозначение углов α и β , то есть при расчете получается результат с минусом. По нашему мнению, при таком обозначении углов α и β формулу нужно было выражать в виде $A = G \cdot l (\cos \beta - \cos \alpha)$

Авторы работ 3, 4 (с. 48) определяют суммарной работы, выражая l через r по формуле $A = G \cdot r (\cos \alpha - \cos \beta)$ кГс·м, где G - суммарный вес всех деталей маятника в кГс;

r - расстояния от центра тяжести маятника до оси вращения (Рис. 2);

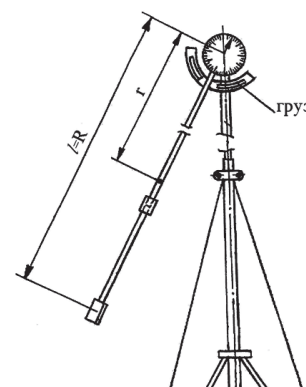


Рис.2.

β - угол исходного положения маятника;

α - угол взлета маятника после совершенной работы.

Поэтому, для выяснения влияния значения r и l на конечный результат произведем расчеты по формулам [1 и 4]. Исходные данные для расчета были приняты из [4. стр. 49]

$$W = Fl (\cos \beta - \cos \alpha) = 15 \cdot 1,99 (\cos 60^\circ - \cos 90^\circ) = 15,76 \text{ кГс·м} \quad (1)$$

$$A = Gr (\cos \alpha - \cos \beta) = 15,9 \cdot 0,99 (\cos 60^\circ - \cos 90^\circ) = 7,85 \text{ кГс·м} \quad (2)$$

Из вышеуказанного видно, что при всех прочих равных условиях результаты, полученные в этих двух формулах, будут различны.

Однако, значение r , в основном, зависит от места расположения груза,

так, если груз расположен на нижней (режущей) части, то значения r и l могут приблизиться друг к другу, в зависимости от величины силы тяжести стержня M_1 и диска M_2 , но не совпадут. Для доказательства этого, теоретически определяем положение центра качания простейшего маятникового копра.

Допустим, что маятниковый копер состоит из однородного стержня длиной l_c , к концу которого прикреплен круглый однородный диск с радиусом

$$r' = \frac{l_c}{8} \quad (\text{рис.3}).$$

В начальный момент маятник отклонен от вертикального, положения на угол φ_0 и ему была сообщена начальная угловая скорость φ'_0 , масса диска в два раза больше массы стержня.

Выбрав направление положительного отсчета угла поворота φ_0 от вертикали против часовой стрелки, направим ось Z вдоль оси привеса маятника в точке O перпендикулярно к плоскости рисунка.

Внешними силами, приложенными к маятнику, являются: $P = M_1 g$ - сила тяжести стержня, $G = M_2 g$ - сила тяжести диска, и R_1 и R_2 - составляющие реакции оси подвеса маятника.

Применяем дифференциальное уравнение вращения твердого тела вокруг неподвижной оси:

$$I_z \cdot \varphi'' = \sum_{k=1}^n m_z(F_k^e) \quad (3)$$

Момент сил R_1 и R_2 , относительно оси привеса Z , равен нулю, следовательно:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n m_z(F_k^e) &= m_z(P) + m_z(G) = \\ &= -M_1 g \frac{l_c}{2} \sin \varphi_0 - M_2 g(l_c + r') \sin \varphi_0 \quad (4) \end{aligned}$$

Знаки минус указывают, что направления момента сил P и G противоположны направлению положительного отсчета угла поворота φ_0

Учитывая, что $M_2 = 2M_1$ и $r' = \frac{l_c}{8}$ получим, что сумма моментов внешних сил относительно оси Z будет

$$\sum_{k=1}^n m_z(F_k^e) = \frac{11}{4} M_1 g l_c \sin \varphi_0 \quad (5)$$

Вычислим момент инерции маятника относительно оси привеса Z как сумму моментов инерции стержня $I_z^{(1)}$ и $I_z^{(2)}$ диска относительно той же оси:

$$I_z = I_z^{(1)} + I_z^{(2)} \quad (6)$$

Применив теорему Штейнера и учитывая, что $M_2 = 2M_1$ и $r' = \frac{l_c}{8}$, находим

$$I_z^{(1)} = M_1 \frac{l_c^2}{12} + M_1 \left(\frac{l_c}{2} \right)^2 =$$

$$= M_1 \frac{1}{3} l_c^2 \approx 0,34 M_1 l_c^2$$

$$\begin{aligned} I_z^{(2)} &= M_2 \frac{r'^2}{2} + M_2 (l_c + r')^2 = \\ &= M_2 \frac{l_c^2}{64} + M_2 \left(l_c^2 + \frac{l_c^2}{4} + \frac{l_c^2}{64} \right) = 1,28 M_2 l_c^2 \quad (8) \end{aligned}$$

Подставив значение M_2 , получим

$$I_z^{(2)} = 1,28 \cdot 2 M_1 l_c^2 \approx 2,56 M_1 l_c^2 \quad (9)$$

следовательно, момент инерции маятника относительно оси привеса равен:

$$\begin{aligned} I_z &= I_z^{(1)} + I_z^{(2)} = \\ &= 0,34 M_1 l_c^2 + 2,56 M_1 l_c^2 = \\ &= 2,9 M_1 l_c^2 \end{aligned} \quad (10)$$

Подставив $\sum_{k=1}^n m_z(F_k^e)$ и I_z из

формулы (5) и (10) в уравнение (3), получим $2,9 M_1 l_c^2 \varphi'' = -2,75 g l_c \varphi_0$

$$\text{или } \varphi'' + \frac{2,75}{2,9 l_c} \sin \varphi_0 = 0$$

Рассмотрим малые колебания маятника, предположив, что $\sin \varphi_0 \approx \varphi_0$, тогда дифференциальное уравнение качаний маятника принимает вид:

$$\varphi'' + \frac{2,75 g}{2,9 l_c} \varphi_0 = 0, \text{ обозначив}$$

$$\frac{2,75 g}{2,9 l_c} = k^2 \quad (11)$$

перепишем полученное уравнение так

Круговая частота колебаний

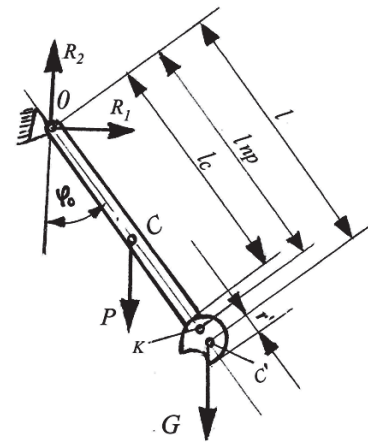


Рис.3.

$k = \sqrt{\frac{2,75 \cdot g}{2,9 \cdot l_c}}$ от начальных условий движения не зависит.

Для определения положения центра качаний данного маятника следует учесть, что центр качаний отстоит от точки привеса O на расстоянии приведенной длиной l_{np} физического маятника (приведенной длиной физического маятника называется длина нити математического маятника, круговая частота качаний которого равна круговой частоте качаний данного физического маятника).

Круговая частота колебаний качаний математического маятника

$$K_M = \sqrt{\frac{g}{l_c}} \text{ для рассматриваемого физического маятника } K_\varphi = \sqrt{\frac{2,75 \cdot g}{2,9 \cdot l_c}}$$

Приравняв квадраты круговых частот K_M и K_φ , находим приведенной длиной физического маятника

$$l_{np} = l_c \frac{2,9}{2,75}$$

Следовательно, центр качаний данного маятникового копра отстоит от точки привеса O на расстоянии

$$l_c \frac{2,9}{2,75} \text{ или } l_{np} = 1,47 l_c \quad (\text{рис.3}).$$

Чтобы выяснить влияние l_{np} и l - расстояние от режущей кромки лезвия ножа до оси подвески на величину энергии, затрачиваемой на срез, произведем соответствующие расчеты по следующим данным:

$$l_c = 2 \cdot m \cdot r^1 = l_c / 8 = 0,25 \text{ м},$$

откуда расстояния от центра качания маятникового копра до точки привеса l_{np} будет равно: $l_{np} = 1,47 \cdot l_c = 1,47 \cdot 2 = 2,94 \text{ м}$, а длина маятника или расстояние от режущей кромки лезвия ножа до оси подвески $l = l_c + r' = l_c + l_c / 8 = 2 + 2 / 8 = 2,25 \text{ м}$, следовательно, энергия, затрачиваемая на срез по значениям l_{np} и l , будет равна:

$$A_1 = G \cdot l_{np} (\cos 60^\circ - \cos 90^\circ) = 15,9 \cdot 2,94(0,5 - 0) = 16,6 \text{ кГс} \cdot \text{м}$$

$$A_2 = G l (\cos 60^\circ - \cos 90^\circ) = 15,9 \cdot 2,25(0,5 - 0) = 18 \text{ кГс} \cdot \text{м}$$

Отсюда следует, что разница составляет 8%, что соответствует значению $\frac{M_2}{M_1} = 2$ или $M_2 = 2 M_1$. Однако, основным фактором, влияющим на значения l_{np} и A_1 , является величина $\frac{M_2}{M_1}$. Например, для случая $M_2 = M_1$ из формулы (8)

$$J_z^{(2)} = 1,28 M_2 l_c^2 = 1,28 M_1 l_c^2$$

$$J_z = J_z^{(1)} + J_z^{(2)} = 0,34 M_1 l_c^2 + 1,28 M_1 l_c^2 = 1,62 M_1 l_c^2$$

производя аналогичные расчеты, получим

$$l_{np} = 1,62 / 2,75 l_0 \approx 0,66 \cdot 2 = 1,32 \text{ м}$$

$$A_1 = 15,9 \cdot 1,32(0,5 - 0) = 10,45 \text{ кГс} \cdot \text{м},$$

а при этом разница результатов между значениями A_1 и A_2 составляет 42 % и т.д.

Из сравнительных расчетов видно, что с уменьшением массы груза M_1 пропорционально уменьшается значение l_{np} и соответственно, увеличивается разница величины результатов между A_1 и A_2 .

Анализируя приведенные примеры расчетов, можно сделать вывод, что величина расстояния r , от оси вращения до центра тяжести (приведенная длина l_{np}) маятникового копра зависит от массы груза и его места расположения. Для конструкций маятниковых копёр - динамографов, с закрепленным грузом на его верхней

части [4] (рис.2), с увеличением веса груза значение r уменьшается, а для конструкции маятниковых копров, в которых груз закрепляется на нижней части маятника [2] (рис. 1) наоборот, с увеличением веса груза увеличивается.

Как видно определение работы, совершаемой маятником, на срезе установленной стружки образца достаточно полно изложено в [4] и для используемых в ней понятий l - плечо физического маятника и r - расстояние от центра тяжести маятника до оси его вращения, который нетрудно найти ясное физическое толкование.

Здесь надо заметить, что авторы статьи [1] и книги [2] ошибаются, так как l зависит от конструктивной особенности стержня и места установки груза на маятнике.

Таким образом, показана возможность применения данной теории для определения положения плеча физического маятника, которые должны внести определенную ясность в вопросы теории определения ударной вязкости материалов. Сущность этой теории надо учитывать при определении ударной вязкости материалов, в противном случае могут быть ошибочные результаты. Поэтому целесообразно было бы ввести данную теорию при изучении курсов: физика; теоретической механики; сопротивление материалов в виде теоретических знаний и лабораторной работы.

References:

1. Llai S.I., Ezhevskaja. R.A., Antonenko. E.I. Praktikum po mashinovedeniju [Practical notes on the engineering science]. - Moskva., «Prosveshhenie» 1985. Dinamicheskie ispytaniya na izgib (udarnaya proba) [Dynamic tests for a bend (shock test)], pp. 111-114
2. Sedukov. V.T. Issledovanie processa razrusheniya slezhavshisja mineral'nyh udobrenij rezaniem [Research of the process of destruction of packed mineral fertilizers by cutting]. CNIIMJeSH nechernozemnoj zony SSSR [CSRIMEA of the nonchernozem zone USSR]. Proceedings, Vol. II. Publishing house «Vysshaja shkola». - Minsk., 1964., pp. 270-277;

3. Bogdanov. P.P. Skorostnoe rezanie stebel'nyh materialov na ustanovkah majatnikovogo tipa - «Mechanizacija i jelektrifikacija socialisticheskogo sel'skogo hozjajstva» [High-speed cutting of the caulescent materials using the pendular type devices - «Mechanization and electrification of socialist agriculture»]. - 1972., No. 4., pp. 51-52;

4. Reznik. N.E. Teorija rezaniya lezviem i osnovy rascheta rezhushhih apparatov [The theory of cutting by a blade and foundations of calculations related to the cutting devices] - Moskva., «Mashinostroenie». 1975., Jeksperimental'nye issledovaniya processa rezaniya materiala v sloe [Experimental studies on the process of cutting of material in a layer]., pp. 44-50.

Литература:

1. Ллаи С.И., Ежевская. Р.А., Антоненко. Е.И. Практикум по машиноведению. - Москва., «Просвещение» 1985. Динамические испытания на изгиб (ударная проба), с. III-114
2. Седуков. В.Т. Исследование процесса разрушения слежавшихся минеральных удобрений резанием. ЦНИИМЭСХ нечерноземной зоны СССР. Труды, том II. Издательство «Высшая школа». - Минск., 1964., с. 270-277;
3. Богданов. П.П. Скоростное резание стебельных материалов на установках маятникового типа - «Механизация и электрификация социалистического сельского хозяйства». - 1972., №4., с. 51-52;
4. Резник. Н.Е. Теория резания лезвием и основы расчета режущих аппаратов - Москва., «Машиностроение». 1975., Экспериментальные исследования процесса резания материала в слое, с. 44-50.

Information about author:

1. Hojamberdi Tagaev - Doctor of International Academy "Antique World", Director of Scientific Center of Invantions of Academy, Full professor, Lecturer, Jizzakh State Pedagogical Institute; address: Uzbekistan, Jizzakh city; e-mail: bahrom.ms_inbox.ru

GISAP Championships and Conferences 2016

Branch of science	Dates	Stage	Event name
JANUARY			
Educational sciences and Psychology	19.01-26.01	I	Modern peculiarities of the identity formation and social adaptation in conditions of the liberal values crisis
FEBRUARY			
Philology	09.02-15.02	I	Theoretical and practical problems of language tools transformation in the context of the accelerated development of public relations
Culturology, Physical culture and Sports, Art History, History and Philosophy	09.02-15.02	I	Cultural and historical development of the society as the dynamic expression of the self-learning human existence
MARCH			
Medicine, Pharmaceutics, Biology, Veterinary Medicine and Agricultural sciences	10.03-15.03	I	Problems of fighting human and animal diseases in terms of the biosphere conditions deterioration
Economics, Jurisprudence and Management, Sociology, Political and Military Sciences	10.03-15.03	I	Social relations and conflicts in conditions of intensification of economic processes and dominance of liberal ideology
APRIL			
Physics, Mathematics and Chemistry, Earth and Space Sciences	06.04-12.04	I	Theoretical and applied problems of physical, mathematical and chemical sciences in the context of the social demand for the knowledge limits expansion
Technical Science, Architecture and Construction	06.04-12.04	I	Methods of effective science-based satisfaction of the increasing social needs in the field of engineering, construction and architecture
MAY			
Educational sciences and Psychology	12.05-17.05	II	Influence of knowledge and public practice on the development of creative potential and personal success in life
JUNE			
Philology	08.06-13.06	II	Issues of preservation of originality and interference of national languages in conditions of globalized international life
Culturology, Physical culture and Sports, Art History, History and Philosophy	08.06-13.06	II	Human creativity phenomenon in ups and downs of the historical process
JULY			
Medicine, Pharmaceutics, Biology, Veterinary Medicine and Agricultural sciences	06.07-12.07	II	Innovative approaches in diagnostics and treatment of human and animal diseases caused by injuries, genetic and pathogenic factors
Economics, Jurisprudence and Management, Sociology, Political and Military Sciences	06.07-12.07	II	Value of the personality and collective interactions in the social progress ensuring process
AUGUST			
Physics, Mathematics and Chemistry, Earth and Space Sciences	04.08-10.08	II	Modern methods of studying matter and interaction of substances, as well as the subject-based relations modeling
Technical Science, Architecture and Construction	04.08-10.08	II	Solving problems of optimal combination of standards of quality, innovative technical solutions and comfort of operation when developing and producing devices and construction objects
SEPTEMBER			
Educational sciences and Psychology	13.09-19.09	III	Harmonious personal development problem in relation to specificity of modern education and socialization processes
OCTOBER			
Philology	05.10-10.10	III	Trends of language cultures development through the prism of correlation between their communicative functions and cultural-historical significance
Culturology, Physical culture and Sports, Art History, History and Philosophy	05.10-10.10.10	III	Significance of personal self-expression and creative work in the course of formation of the society's cultural potential
NOVEMBER			
Medicine, Pharmaceutics, Biology, Veterinary Medicine and Agricultural sciences	10.11-15.11	III	Modern methods of ensuring health and quality of human life through the prism of development of medicine and biological sciences
Economics, Jurisprudence and Management, Sociology, Political and Military Sciences	10.11-15.11	III	Correlation between humanity and pragmatism in target reference points of modern methods of public relations regulation
DECEMBER			
Physics, Mathematics and Chemistry, Earth and Space Sciences	07.12-13.12	III	Object-related and abstract techniques of studying spatio-temporal and structural characteristics of matter
Technical Science, Architecture and Construction	07.12-13.12	III	Current trends in development of innovations and implementation of them into the process of technical and construction objects production

Expert board:

Rena Kasumova (Azerbaijan), Nathan Lebrun (France), Yuri Khlopkov (Russia),
Brian Hurst (UK)

“Hypothetics: everlasting stories”

Dear readers!

Thomas Morgan
Head of the IASHE International Projects Department
December 11, 2015

GISAP: Physics, Mathematics and Chemistry №7 Liberal* (December, 2015)

Chief Editor – J.D., Prof., Acad. V.V. Pavlov
Copyright © 2015 IASHE

ISSN 2054-6483
ISSN 2054-6491 (Online)

Design: Yury Skoblikov, Helena Grigorieva, Alexander Standichenko

Published and printed by the International Academy of Science and Higher Education (IASHE)
1 Kings Avenue, London, N21 1PQ, United Kingdom
Phone: +442071939499, e-mail: office@gisap.eu, web: <http://gisap.eu>

! No part of this magazine, including text, illustrations or any other elements may be used or reproduced in any way without the
• permission of the publisher or/and the author of the appropriate article

Print journal circulation: 1000

“*Liberal – the issue belongs to the initial stage of the journal foundation, based on scientifically reasonable but quite liberal editorial policy of selection of materials. The next stage of the development of the journal (“Professional”) involves strict professional reviewing and admission of purely high-quality original scientific studies of authors from around the world”

